

Direkte Numerische Simulation binärer Kollisionen newtonscher und nichtnewtonscher Tropfen

Direct Numerical Simulation of binary collisions
of Newtonian and non-Newtonian droplets

Vom Fachbereich Maschinenbau an der Technischen Universität Darmstadt zur
Erlangung des akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation von Dipl.-Ing. Christian Alexander Focke aus Wiesbaden
Tag der Einreichung 7. Mai 2013

Tag der mündlichen Prüfung 21. August 2013

Berichterstatter: Prof. Dr. Dieter Bothe

Mitberichterstatter: Prof. Dr.-Ing. Cameron Tropea

Darmstadt 2013, D 17



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT



Center of
Smart Interfaces



Mathematical
Modeling and Analysis

Direkte Numerische Simulation
binärer Kollisionen
newtonscher und nichtnewtonscher Tropfen
Direct Numerical Simulation of binary collisions
of Newtonian and non-Newtonian droplets

Vorgelegte Dissertation von Dipl.-Ing. Christian Alexander Focke aus Wiesbaden

Berichterstatter: Prof. Dr. Dieter Bothe
Mitberichterstatter: Prof. Dr.-Ing. Cameron Tropea

Tag der Einreichung: 7. Mai 2013
Tag der mündlichen Prüfung 21. August 2013

Darmstadt — D 17



Danksagung

An dieser Stelle möchte ich herzlich all denen danken, die durch ihre fachliche und moralische Unterstützung zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt

Herrn Prof. Dr. Dieter Bothe für seine stete Förderung und Unterstützung bei der Arbeit und die vielen Anregungen und Ideen, die mir auch in meinem weiteren beruflichen Werdegang sehr hilfreich sein werden,

Herrn Prof. Dr.-Ing. Cameron Tropea danke ich für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme der Zweitkorrektur,

Herrn Dr. habil. Ilia Roisman für seine stete Diskussionsbereitschaft und Begeisterung bei der Modellierung von Tropfenkollisionen,

Herrn Dr.-Ing. Holger Marschall für seine Unterstützung bei allen Fragestellungen, die eine Promotion mit sich bringt,

sowie allen anderen Kolleginnen und Kollegen des Institutes für Mathematische Modellierung und Analysis, die durch die vielen interessanten Diskussionen und das gute gemeinschaftliche Miteinander ihren Beitrag zum erfolgreichen Abschluss dieser Arbeit geleistet haben.

Darmstadt, im 10. Mai 2013

Christian Alexander Focke

Kurzfassung

Binäre Tropfenkollisionen werden als ein Elementarprozess in Sprays betrachtet. Sie beeinflussen die resultierende Tropfengrößenverteilung maßgeblich. Um eine verbesserte Vorhersage des Ausgangs von Tropfenkollisionen zu ermöglichen, ist ein Verständnis des Einflusses der Flüssigkeitsrheologie auf die Kollisionsdynamik wie auch auf die Strömung im Inneren der kollidierenden Tropfen erforderlich. Daher werden Direkte Numerische Simulationen (DNS) mit dem Inhouse-Code Free Surface 3D (FS3D) durchgeführt, einer erweiterten Volume-of-Fluid (VOF) Methode. Kollisionen von nicht-isoviskosen, scherverdünnenden und viskoelastischen Tropfen werden untersucht.

Ein zentrales Ziel der Forschung ist die Herleitung von mechanistischen Modellen für den Ausgang von Kollisionen, die für skalenreduzierte numerische Berechnungen wie Euler-Euler- oder Euler-Lagrange-Simulationen verwendet werden können. Die getrennte Betrachtung von Lamellengeometrie und Lamellendickenevolution erlaubt die Vorhersage der Kollisionsdynamik zentraler Kollisionen viskoser Tropfen im sprayrelevanten Bereich moderater Reynolds- und Weberzahlen.

Bei Tropfenkollisionen entstehen extrem dünne Flüssigkeitslamellen, vor allem im Fall einer hohen Aufprallgeschwindigkeit. Diese müssen im numerischen Lösungsverfahren in physikalisch sinnvoller Weise berücksichtigt werden. Dazu wird ein Stabilisierungs-Algorithmus entwickelt, der die Lamelle vor dem auflösungsbedingten Zerfall bewahrt, ohne die Bewegungen und die Deformationen der Fluidlamelle einzuschränken.

Verschiedene Trocknungshistorien führen bei Gemischtropfen zu einer unterschiedlichen Zusammensetzung. Die Kollision von Tropfen mit ungleicher Viskosität erfordert eine Erweiterung des VOF-Verfahrens durch Lösen einer zusätzlichen Transportgleichung, um die Verteilung des Polymermassenanteils innerhalb des Stoßkomplexes zu erhalten. Um die in den Experimenten beobachtete Koaleszenzverzögerung zu erfassen, wird die Topologieänderung numerisch verzögert. Die Ergebnisse geben einen Einblick in Eindring- und Verkapselungsprozesse.

DNS von Kollisionen scherverdünnender Tropfen zeigen, dass nahezu die gesamte viskose Dissipation während der Anfangsphase der Kollision auftritt. Daher kann eine effektive konstante Viskosität gefunden werden, die sowohl in zentralen als auch in dezentralen Kollisionen zu derselben Kollisionsdynamik führt.

Um viskoelastische Zweiphasenströmungen zu simulieren, wurde die VOF-Methode für Oldroyd-B Fluide erweitert. Die Ergebnisse zeigen, dass die Dehnung der Polymermoleküle im Ligament dem Zerfall der Tropfen bei einer dezentralen Kollision entgegen wirkt.

Im Rahmen dieser Arbeit entstandene Veröffentlichungen

C. Focke, D. Bothe: Further Development of VOF-Based Computational Methods for Numerical Investigations of Droplet Collisions. In *Proc. of SPRAY 2010, 9. Workshop über Sprays, Techniken der Fluidzerstäubung und Untersuchungen von Sprühvorgängen*, Heidelberg, 2010.

C. Focke, D. Bothe: Computational Analysis of Binary Collisions of Shear Thinning Droplets. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 166: 799–810, 2011.

C. Focke, D. Bothe: Towards a Computational Analysis of Binary Collisions of Shear Thinning Droplets. In *Proc. of ILASS 2011, 24th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. Estoril, Portugal, 2011.

C. Focke, D. Bothe: Towards a Computational Analysis of Binary Collisions of Shear Thinning Droplets. In *Proc. of CFD 2011, 8th International Conference on CFD*, Trondheim, Norwegen, 2011.

C. Focke, D. Bothe: Direkte Numerische Simulation Binärer Kollisionen Scherverdünnender Tropfen. *Chemie Ingenieur Technik*, 84(1-2):1–7, 2012.

C. Focke, D. Bothe: Direct Numerical Simulation of Binary Off-Center Collisions of Shear Thinning Droplets at High Weber Numbers. *Physics of Fluids*, 24(7):073105, 2012.

C. Focke, D. Bothe: Computational Analysis of Binary Collisions of Non-Isoviscous Liquid Droplets. In *Proc. of SPRAY 2012, 10. Workshop über Sprays, Techniken der Fluidzerstäubung und Untersuchungen von Sprühvorgängen*, Berlin, 2012.

C. Focke, D. Bothe, M. Kuschel, M. Sommerfeld: Experiments and Direct Numerical Simulations of Binary Collisions of Miscible Liquid Droplets with Different Viscosities. In *Proc. of ICLASS 2012, 12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, Heidelberg, 2012.

C. Focke, M. Kuschel, D. Bothe, M. Sommerfeld: Collision between High and Low Viscosity Droplets: Direct Numerical Simulations and Experiments. *International Journal of Multiphase Flow*, 56: 81-92, 2013.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|----|
| 1. Einleitung | 1 |
| 1.1. Elementarprozesse im Spray | 1 |
| 1.2. Physikalische Grundlagen der Tropfenkollision | 5 |
| 1.3. Numerische Untersuchungen von Tropfenkollisionen | 10 |
| 2. Kontinuumsmechanische Modellierung | 13 |
| 2.1. Navier-Stokes Gleichungen | 13 |
| 2.2. Modellierung viskoelastischer Fluide | 14 |
| 2.3. Sprungbedingungen | 15 |
| 2.4. Einfeldformulierung | 16 |
| 3. Numerische Methode | 17 |
| 3.1. Finite Volumen Diskretisierung | 17 |
| 3.2. Volume-of-Fluid Methode | 17 |
| 3.3. Bestimmung von Grenzflächentermen | 19 |
| 3.4. Algorithmus | 22 |
| 4. Lamellenstabilisierung | 26 |
| 4.1. Problematik | 26 |
| 4.2. Stabilisierung im Fall einer symmetrischen Kollision | 28 |
| 4.3. Stabilisierung im Fall einer asymmetrischen Kollision | 32 |
| 5. Mechanistische Modellierung der Kollision viskoser Tropfen | 42 |
| 5.1. Modellerweiterung | 45 |
| 5.2. Validierung | 46 |
| 5.3. Ergebnisse | 49 |
| 6. Kollision von Tropfen mit ungleicher Viskosität | 56 |
| 6.1. Modellierung | 57 |
| 6.2. Validierung | 60 |
| 6.3. Ergebnisse | 63 |
| 7. Kollision von Tropfen mit scherratenabhängiger Viskosität | 76 |
| 7.1. Modellierung und Implementierung | 76 |
| 7.2. Verifizierung und Validierung | 78 |
| 7.3. Ergebnisse: Zentrale Tropfenkollisionen | 86 |

| | |
|--|-----|
| 7.4. Ergebnisse: Dezentrale Tropfenkollisionen | 93 |
| 8. Kollision von Tropfen mit viskoelastischen Fließeigenschaften | 105 |
| 8.1. Validierung | 107 |
| 8.2. Ergebnisse | 111 |
| 9. Zusammenfassung und Ausblick | 121 |
| Literaturverzeichnis | 125 |
| A. Parameter der Simulationen | 136 |

Nomenklatur

| Lateinische Großbuchstaben | | Einheit |
|-----------------------------|-----------------------------|----------------------------|
| <i>A</i> | Fläche | m^2 |
| A | Konfigurationstensor | - |
| <i>D</i> | Durchmesser | m |
| D | Deformationsratentensor | 1/s |
| <i>E</i> | Energie | J |
| <i>F</i> | Kraft | N |
| <i>H</i> | Federkonstante | N/m |
| I | Einheitsmatrix | - |
| <i>K</i> | Koeffizient des Power-Law | - |
| <i>L</i> | Länge | m |
| S | Spannungstensor | N/m^2 |
| <i>T</i> | Temperatur | K |
| T | Grenzflächenspannungstensor | Pa |
| <i>U</i> | Geschwindigkeit | m/s |
| <i>V</i> | Volumen | m^3 |
| Lateinische Kleinbuchstaben | | Einheit |
| <i>b</i> | Abstand der Tropfenbahnen | m |
| <i>d</i> | Diffusionskoeffizient | m^2/s |
| <i>f</i> | Phasenindikatorfunktion | - |
| g | Gravitation | m/s^2 |
| j | Diffusionsfluss | $\text{kg}/(\text{m s}^2)$ |
| <i>k</i> | Boltzmann-Konstante | J/K |
| <i>m</i> | Masse | kg |
| <i>n</i> | Koeffizient des Power-Law | - |
| n | Normalenvektor | m |
| <i>p</i> | Druck | Pa |
| <i>t</i> | Zeit | s |
| v | Geschwindigkeitsvektor | m/s |

| | | |
|------------------------------------|-----------------------|-------------------|
| x, y, z | Koordinatenachsen | - |
| y | Massenanteil | - |
| Griechische Großbuchstaben | | Einheit |
| Δ | Differenz | - |
| Σ | Interface | - |
| Φ | extensive Größe | - |
| Ω | Gebiet | - |
| Griechische Kleinbuchstaben | | Einheit |
| $\dot{\gamma}$ | Scherrate | s^{-1} |
| δ | Dirac-Distribution | - |
| ζ | Reibungskoeffizient | kg/s |
| η | dynamische Viskosität | Pa s |
| κ | Krümmung | m^{-1} |
| λ | Relaxationszeit | s |
| ρ | Dichte | kg/m ³ |
| σ | Oberflächenspannung | N/m |
| τ | Zeitskala | s |
| Indizes | | |
| 0 | Initialwert | |
| Σ | Interfacewert | |
| c | kontinuierlich | |
| ch | charakteristisch | |
| d | dispers | |
| diff | Diffusion | |
| diss | dissipiert | |
| eff | effektiv | |
| el | elastisch | |
| hv | hochviskos | |
| int | Oberfläche | |
| kin | kinetisch | |
| lam | Lamelle | |
| lv | niedrigviskos | |

| | |
|-----|---------|
| max | maximal |
| min | minimal |
| mom | Impuls |
| P | Polymer |
| rel | relativ |
| S | Solvent |
| t | Zeit |

Abkürzungen

| | |
|------|---|
| FS3D | Free Surface 3D |
| CFL | Courant-Friedrichs-Lewy |
| CSI | Center of Smart Interfaces |
| CV | Kontrollvolumen |
| DE | Deborahzahl |
| DFG | Deutsche Forschungsgemeinschaft |
| DNS | Direkte Numerische Simulation |
| FV | Finite Volumen |
| MMA | Mathematische Modellierung and Analysis |
| PVP | Polyvinylpyrrolidon |
| Re | Reynoldszahl |
| SPP | Schwerpunktprogramm |
| VOF | Volume-of-Fluid |
| We | Weberzahl |
| Wi | Weissenbergzahl |
| X | Kollisionsparameter |



1 Einleitung

Die vorliegende Arbeit ist im Rahmen des Schwerpunktprogramms (SPP) 1423 “Prozess-Spray” der Deutschen Forschungsgesellschaft (DFG) entstanden. Gegenstand der Forschung ist die Herstellung partikulärer Produkte mittels Sprühverfahren. Insbesondere soll die Vorhersage der Eigenschaften des Endprodukts verbessert werden.

Um dieses Ziel zu erreichen, müssen Schließungsgesetze entwickelt werden, die den Ausgang von Tropfenkollisionen beschreiben. Diese Schließungsgesetze können dann in Simulationen mit reduziertem Detailgrad für die Betrachtung des Gesamtprozesses genutzt werden. Außerdem soll ein grundlegendes Verständnis des Elementarprozesses der Tropfenkollision erlangt werden. Daher werden binäre Tropfenkollisionen mittels Direkter Numerischer Simulationen untersucht. Mit dem Einsatz komplexer Fluide für die Herstellung von Partikeln kommt das Fließverhalten in den Fokus. Daher werden insbesondere die Kollisionen viskoser und nichtnewtonscher Tropfen untersucht.

Um den hier untersuchten Elementarprozess der binären Kollision fluidier Partikel einordnen zu können, wird im Folgenden das Spray als Werkzeug zur Herstellung partikulärer Produkte erläutert. Anschließend werden die gängigen Kennzahlen, mit denen Tropfenkollisionen beschrieben werden, eingeführt. Am Ende des Kapitels wird eine Übersicht über die numerischen Untersuchungen von Tropfenkollisionen vorgestellt.

1.1 Elementarprozesse im Spray

Ein Spray kann als integrierter Prozess vom Ausgangsfluid zum fertigen Produkt aufgefasst werden. Die durchlaufenen Phasen sind in Abbildung 1.1 dargestellt. Sie können eingeteilt werden in Zerstäubung (Primärzerfall), weiterer Zerfall der entstandenen Ligamente (Sekundärzerfall), Tropfenflug im Bereich des dichten Sprays mit Tropfenkollisionen im Spray und schließlich Tropfenflug im verdünnten Spray. Hier erfolgt schließlich der Übergang zum Feststoff mittels Trocknung, Polymerisation oder Erstarrung.

Primärzerstäubung

Bei der Primärzerstäubung wird eine zusammenhängende Flüssigkeit in kleine Tropfen aufgeteilt. Beim Sprühprozess müssen interne und externe Kräfte die

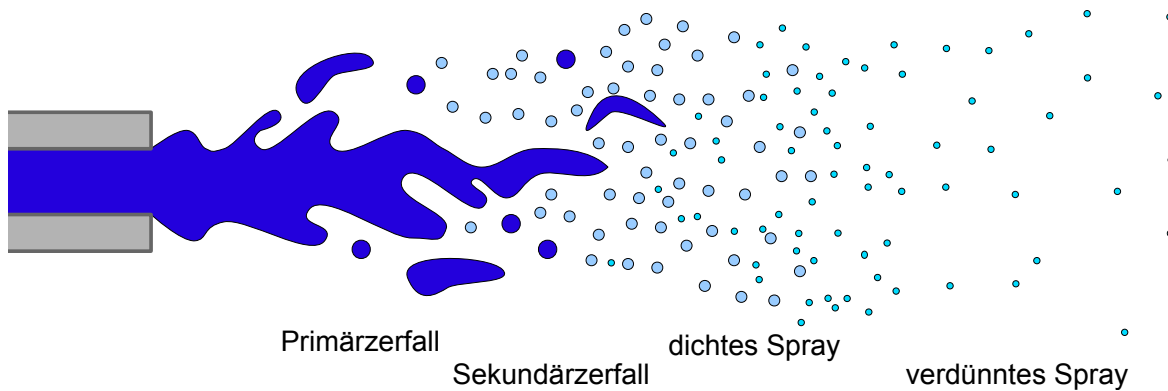


Abb. 1.1.: Unterteilung eines Sprays in Zonen.

Oberflächenspannungskraft überwinden. Die Flüssigkeitsviskosität hat eine stabilisierende Wirkung; aerodynamische Kräfte unterstützen den Zerfall. Die durch den Primärzerfall entstehenden Tropfen sind oft instabil, sodass sich die resultierende Tropfengrößenverteilung erst im weiteren Verlauf während des Sekundärzerfalls einstellt^[58].

Der Primärzerfall eines Flüssigstrahls lässt sich nach Reitz^[100] in vier Regime einteilen. Beim Zerfall aufgrund der Plateau-Rayleigh-Instabilität übersteigen die resultierenden Tropfendurchmesser den Strahldurchmesser. Die Zerfallslänge des Strahls beträgt mehrere Strahldurchmesser. Beim ersten windinduzierten Zerfallsregime wird der Zerfallsprozess durch eine statische Druckverteilung entlang des Strahls unterstützt. Die Tropfengröße entspricht etwa dem Strahldurchmesser, die Zerfallslänge beträgt mehrere Strahldurchmesser. Beim zweiten windinduzierten Zerfallsregime führt eine höhere Relativgeschwindigkeit zwischen Flüssigkeit und Umgebungsgas zu Oberflächenwellen. Diese Wellen verstärken sich, sodass es zum Zerfall kommt. Der durchschnittliche Tropfendurchmesser ist kleiner als der Strahldurchmesser. Das vierte Zerfallsregime ist die Zerstäubung, bei der die Flüssigkeit direkt am Düsenaustritt in Tropfen mit Durchmessern deutlich unterhalb des Strahldurchmessers zerfällt. Numerische Simulationen der Primärzerstäubung finden sich beispielsweise bei Herrmann et al.^[48,49,97], Weigand et al.^[111,112,136] und Zaleski et al.^[37,121,134].

Beim Zerfall eines Flüssigkeitsfilms lassen sich ebenfalls unterschiedliche Regime identifizieren^[34]. Das Rand-Regime zeichnet sich dadurch aus, dass ein dicker Rand an der Seite des Films aufgrund der Oberflächenspannung entsteht, sich vom Film ablöst und dann wie ein Strahl zerfällt. Im Regime "Perforierter Film" bilden sich Löcher im Film, die sich schnell vergrößern. Die dabei entstehenden Flüssigkeitsligamente zerfallen zu Tropfen. Im Wellen-Regime zerfällt der Film abhängig von der Wellenlänge, ohne dass vorher Löcher entstehen.

Sekundärzerteilung

Der Zerfall von Tropfen und Ligamenten, die bei der Primärzerteilung entstehen, wird Sekundärzerteilung genannt. Ein fallender Tropfen zerfällt, sobald der externe aerodynamische Druck nicht durch den Innendruck aufgrund von Grenzflächen-spannung kompensiert werden kann. In diesem Fall führt eine weitere Verformung zu einem geringeren Innendruck und der Tropfen zerfällt in kleinere Tropfen^[40]. Abhängig vom Strömungsregime ergeben sich verschiedene Zerfallsmechanismen. Beispielfhaft sei hier nur der “Bag Breakup” genannt, der bei hoher Geschwindigkeitsdifferenz zur Außenströmung entsteht. Bis zu einer kritischen Geschwindigkeit plattet sich der Tropfen ab. Oberhalb der kritischen Geschwindigkeit bildet sich ein torusförmiger Rand mit einer Flüssigkeitslamelle im Inneren, die sich wie eine Tasche aufwölbt, bis zuerst die Tasche und anschließend der Rand in kleine Tropfen zerfallen^[60]. Die Kollision von Tropfen wird ebenfalls der Sekundärzerteilung zugerechnet und beeinflusst die Partikelgrößenverteilung maßgeblich. Für Kraftstoffsprays geben MacInnes und Bracco (1991)^[63] eine Anzahl von 10^8 Kollisionen $1/(s\text{ cm}^3)$ an. Tropfenkollisionen treten im Bereich des dichten Sprays auf, wenn Tropfen mit unterschiedlicher Geschwindigkeit die Zerfallszone verlassen. Zusätzlich führen unterschiedliche Tropfengrößen zu unterschiedlichen Fallgeschwindigkeiten (größere Tropfen haben eine höhere Fallgeschwindigkeit), sodass die Tropfen kollidieren. Des Weiteren ereignen sich Kollisionen nahe der Wand, da die Tropfen dort abgebremst und abgelenkt werden, sowie in Zirkulationszonen eines Sprays. Die Interaktion von zwei oder mehreren Sprays, beispielsweise in Raketenbrennkammern, führt ebenfalls zu Kollisionen.

Feststoffbildung

Der letzte Prozessschritt bei der Herstellung partikulärer Produkte mittels Sprühverfahren ist das Überführen der Tropfen in Feststoff. Mögliche Partikelformen sind in Abbildung 1.2 dargestellt. Das Überführen der Tropfen in Feststoff kann mittels Trocknung, Erstarren und Reaktion sowie Kombinationen dieser Prozesse geschehen.

- **Trocknung**

Die Trocknung ist ein gekoppelter Prozess von Wärme- und Stoffübertragung, bei der Verdampfungswärme durch die Tropfenoberfläche übertragen wird und gleichzeitig Dampf zurück in den Gasstrom getragen wird. Die Verdampfung hat eine große Bedeutung beim Einsatz von Brennstoff. Dabei ist die Oberflächenvergrößerung und die damit effiziente Verdampfung der Tropfen der Grund für den Einsatz eines Sprays^[58]. Im Kontext der Partikelproduktion ist die Flüssigkeit Träger von gelöstem oder suspendiertem Feststoff.

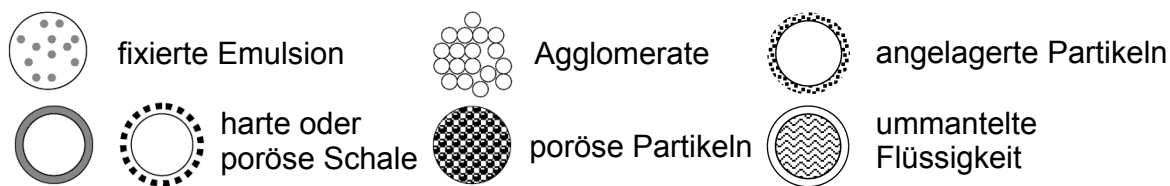


Abb. 1.2.: Mögliche Partikelformulierungen nach der Feststoffbildung, entnommen aus^[35].

Der Trocknungsprozess wird nach Masters (1991)^[65] in vier Phasen eingeteilt. Zuerst erfolgt die Zerstäubung mittels Düse oder Rotationszerstäuber. Die zweite Phase ist der Spray-Luft Kontakt. Hier gibt es die Möglichkeiten, dass sich beide Phasen entweder in eine Richtung bewegen (Co-Current) oder entgegengesetzt (Counter-Current) oder, dass die Flüssigkeit entgegengesetzt zum Luftstrom versprüht wird und beides über einen Auslass abgesaugt wird (Mixed). Anschließend erfolgt der eigentliche Trocknungsschritt. Dabei wird die Verdunstung der Trägerflüssigkeit in zwei Abschnitte eingeteilt. Zuerst erfolgt die Verdunstung direkt an der Tropfenoberfläche bis Krustenbildung einsetzt und anschließend wird die eingeschlossene Flüssigkeit verdunstet^[44]. Die Partikelmorphologien umfassen Partikel mit einer porösen oder geplatzten Schale, geschrumpfte Partikel sowie Vollpartikel^[116]. Trocknungsmodelle unterscheiden beide Verdunstungsabschnitte und betrachten den Verdunstungsprozess 1D-kugelsymmetrisch^[44,45]. Die letzte Prozessphase ist die Produktseparation. Zur Veranschaulichung der Partikelmorphologien sind in Abb. 1.3 rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen sprühgetrockneter Partikel wiedergegeben.

- **Chemische Reaktion**

Um Polymerpulver zu gewinnen, sind bei der herkömmlichen Produktionsweise viele Verarbeitungsschritte notwendig. Die Produktionsschritte umfassen die Polymerisation in einem oder mehreren Reaktoren sowie die anschließende Partikel-Formulierung, beispielsweise mittels Trocknen, Mahlen und Agglomeration. Die Kombination dieser verschiedenen Prozesse in einem einzigen Vorgang wird One-Step-Prozess genannt. Es existieren verschiedene reaktive Sprühtrocknungs- (Reactive Spray Drying, kurz RSD-) Konzepte, wobei die Temperatur der dispersen Phase, die Zeit der Reaktion und der Wärmeübergangsmechanismus für die Verdampfung berücksichtigt werden. Zu nennen sind die Normal-, Hoch-, Tief-Temperatur, Absorptions-/Desorptions- oder Mikrowellen-RSD^[98]. Ein Konzept, welches an der TU Bergakademie Freiberg im Rahmen des DFG-SPP 1423 "Process Spray" erforscht wird, ist das Zerstäuben der Ausgangsstoffe mittels 3-Stoff-Düse^[119]. Diese Düse hat drei verschiedene Zuführungen (Feeds) für die Starter-Lösung, Monomer-Lösung und das Zerstäubungsgas. Zuerst werden die Reaktanden innerhalb der Düse vor dem Düsenaustritt gemischt und anschließend wird das Gemisch mit Hilfe von

Zerstäubungsgas versprüht. Die optimale Prozesseinstellung garantiert eine erfolgreiche Tropfenbildung und generiert gleichzeitig vollständig polymerisierte Teilchen mit einem gewünschten Molekulargewicht.

- **Erstarren**

Bei der Herstellung von Metallpulver erfolgt die Überführung von flüssig zu fest mittels Erstarren. Der Erstarrungsprozess kann in sechs Regionen eingeteilt werden^[60]: schnelle Kühlung der flüssigen Phase, Unterkühlung, Nukleation, Rekaleszenz, Erstarrung und schließlich Kühlung der starren Phase. Die Unterkühlung erfolgt, da die Bildung der Feststoffoberfläche Energie benötigt. Während der Kristallbildung heizt sich der Partikel auf (Rekaleszenz) und gibt dabei die beim Schmelzvorgang zugeführte latente Wärme ab.

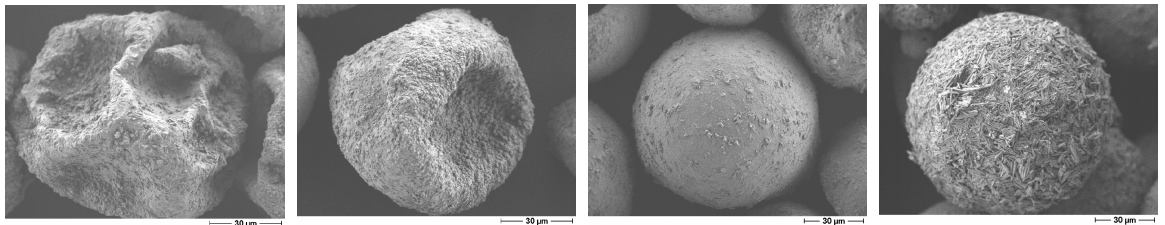


Abb. 1.3.: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von sprühgetrockneten Partikeln bei steigender Trocknungstemperatur, entnommen aus^[59].

1.2 Physikalische Grundlagen der Tropfenkollision

Dimensionslose Kennzahlen

Entscheidend für das Resultat einer Kollision newtonscher Tropfen sind die Weber- und Reynoldszahlen sowie der Kollisionsparameter X . Die Weberzahl

$$We = \frac{\rho D_0 U_{rel}^2}{\sigma} \quad (1.1)$$

ist definiert als Verhältnis der Trägheitskraft zur Oberflächenkraft mit dem initialen Tropfendurchmesser D_0 , der Relativgeschwindigkeit U_{rel} und den Materialparametern Dichte (ρ) und Oberflächenspannung (σ) der Flüssigkeit. Das Verhältnis von Trägheits- zu Zähigkeitskraft wird mit der Reynoldszahl

$$Re = \frac{\rho D_0 U_{rel}}{\eta} \quad (1.2)$$

ausgedrückt, wobei die Flüssigkeitsviskosität η eingeht. Der Kollisionsparameter beschreibt den Versatz der Tropfen und ist definiert als

$$X = \frac{b}{D_0}, \quad (1.3)$$

wobei der Bahnabstand b der Tropfenschwerpunkte eingeht. Im Fall ungleich großer Tropfen wird D_0 durch das arithmetische Mittel der Durchmesser ersetzt. Einflüsse der umgebenden Luftphase werden in diesen dimensionslosen Kennzahlen nicht erfasst.

Kollisionsergebnisse

Generell können fünf verschiedene Kollisionstypen unterschieden werden^[5,36]. Neben Bouncing (Abprallen) existieren vier Kollisionstypen, bei denen die Tropfen verschmelzen, siehe Abbildung 1.4.

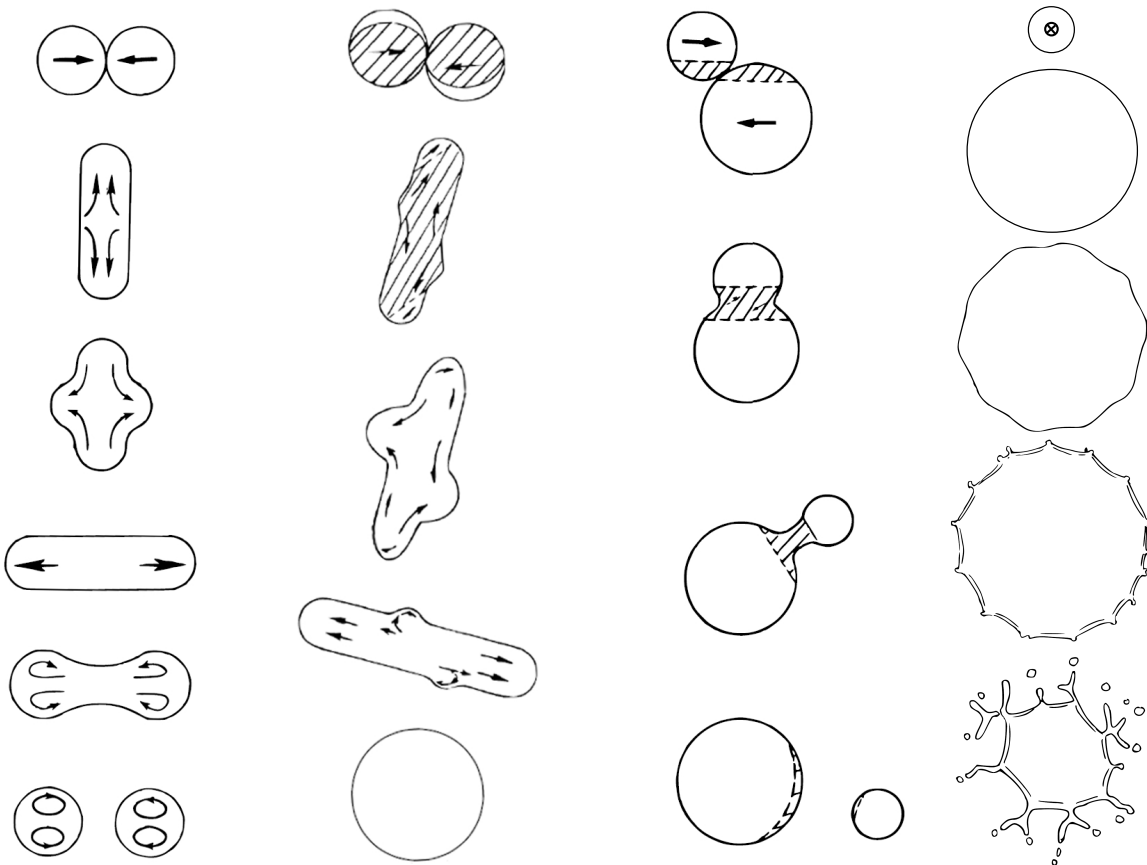


Abb. 1.4.: Schemadarstellung der vier Kollisionsarten mit Verschmelzen. Von links nach rechts: Reflexive Separation, Koaleszenz, Streifende Separation und Splashing. Darstellung nach^[5], Splashing nach eigener Skizze.

- **Bouncing**

Die Tropfen kollidieren, ohne zu verschmelzen, da sich zwischen den Tropfen eine dünne Luftschicht befindet. Die Dicke dieser Luftschicht konnte experimentell mit einer Interferenzmethode bestimmt werden^[64] und befindet sich in der Größenordnung von $0.01\mu\text{m}$. Eine Auflösung dieser Skala in einer Direkten Numerischen Simulation einer Tropfenkollision würde zu einer sehr großen Anzahl von Gitterzellen führen, die derzeit auch mit dem Einsatz von High Performance Computing Techniken nicht handhabbar ist.

- **Koaleszenz**

Wenn die Luftschicht verdrängt werden kann, verschmelzen die Tropfen. Es wird vermutet, dass Van-der-Waals-Kräfte das Verschmelzen begünstigen, bevor die Tropfen in Kontakt kommen^[86,135]. Wenn die Trägheitskräfte der kollidierenden Tropfen zu klein sind, um den Tropfen nach dem Verschmelzen wieder zu zerteilen, wird dieses Kollisionsergebnis Koaleszenz genannt.

- **Streifende Separation**

Die Streifende Kollision entsteht, wenn zwei Tropfen mit großem Versatz kollidieren. Die Trägheit der Tropfen bewirkt, dass große Teile der Tropfen ihre ursprüngliche Flugrichtung beibehalten. Die Koaleszenzregion wird dadurch zu einem Ligament gestreckt und der Kollisionskomplex zerfällt in zwei große Haupttropfen und eventuell noch in zusätzliche Satellitentropfen.

- **Reflexive Separation**

Die Reflexive Separation entsteht bei großen Weber- und Reynoldszahlen. Die Tropfen kollidieren mit wenig Versatz und es bildet sich ein torusförmiger Stoßkomplex mit einer dünnen Pralllamelle im Inneren. Aufgrund der Oberflächenspannung zieht sich der Rand zusammen und es bildet sich eine zigarrenförmige Stoßkomplexgeometrie. Wenn die kinetische Energie in diesem Stadium ausreicht, wächst die Länge des Stoßkomplexes, bis er schließlich zerfällt.

- **Splashing**

Wird die Weberzahl bei Reflexiver Separation erhöht, so vergrößert sich auch der Maximaldurchmesser des Stoßkomplexes. Der Rand des torusförmigen Stoßkomplexes wird dünner und existiert länger. Schließlich setzt die Plateau-Rayleigh-Instabilität auf dem Rand ein. Die Pralllamelle im Inneren des Torus stabilisiert den Rand, sodass die Instabilität, verglichen mit einem Flüssigkeitsstrahl, verzögert eintritt. Bei steigender Weberzahl bilden sich Verdickungen auf dem Torusrand, die sich schließlich als kleine Tropfen vom Kollisionskomplex lösen und radial entfernen.

Simulation eines Sprays

Eine numerische Simulation des gesamten Prozesssprays ist aufgrund der variierenden Gehalte an disperser Phase mit einem einzigen Mehrphasen-Modellansatz

nicht möglich. Die Simulation des dichten Sprays am Düsenaustritt erfolgt in der Regel mit dem Euler-Euler-Ansatz, während für die Simulation des verdünnten Spraynebels meistens der Euler-Lagrange-Ansatz verwendet wird.

Beim Euler-Euler-Ansatz wird das Spray als Kontinuum betrachtet. Daher sind beim Euler-Euler Modell Schließungsterme nötig, welche den Impulsaustausch zwischen kontinuierlicher Phase und dem Spray beschreiben. Zur Vorhersage von Partikel- und Partikelgrößenverteilungen werden Populationsbilanzen verwendet, d.h. die disperse Phase wird durch eine Verteilungsfunktion in Raum, Zeit und den inneren Eigenschaften beschrieben^[89]. Außerdem beeinflussen interpartikuläre Wechselwirkungen und der Zerfall einzelner Tropfen die Größenverteilung und müssen daher zusätzlich in den Populationsbilanzen berücksichtigt werden.

Beim Euler/Lagrange-Verfahren wird nur die kontinuierliche Phase mit Kontinuums-Bilanzgleichungen beschrieben, die durch Phasenwechselwirkungsterme erweitert werden. In der Dispersphase werden die Spraytropfen als einzelne Partikel bzw. Partikelpakete betrachtet und als Punktmassen mit bestimmten Eigenschaften verfolgt. Zur Lösung der Partikel-Bewegungsgleichungen müssen die lokal auf die Partikel wirkenden Kräfte bestimmt werden. Die Bahnen repräsentativer Partikel bzw. Partikelpaketen bestimmen die Größe der Wechselwirkungsterme mit der kontinuierlichen Phase. Neben dem Gesamtphasenanteil ist auch die Partikelgrößenverteilung für die Lösung entscheidend^[89].

Insgesamt hängt die Güte der resultierenden Simulationsergebnisse maßgeblich von den verwendeten Korrelationen zur Beschreibung dieser Elementarprozesse ab^[3,24,89]. Ein für die Spraymodellierung wesentlicher Elementarprozess sind binäre Tropfenstöße im Spray, in denen die Spraypartikel Masse und Impuls austauschen und die letztliche Partikelgrößenverteilung des Produktes eingestellt wird. Um Korrelationen für den Ausgang binärer Kollisionen zu erhalten, können experimentelle Untersuchungen von Kollision durchgeführt werden. Die Ergebnisse werden anschließend systematisch analysiert. Dazu wird ein Kollisionsdiagramm genutzt, welches die Grenzkurven zwischen den einzelnen Kollisionsergebnissen in Abhängigkeit von Versatz und Weberzahl darstellt. Eine qualitative Darstellung wird in Abbildung 1.5 gezeigt.

Ein Kollisionsdiagramm ist für ein Stoffsystem und ein Durchmesser Verhältnis gültig. Tatsächlich liegt bei Tropfenkollisionen ein höherdimensionaler Parameterraum vor, wobei neben der Weberzahl und dem dimensionslosen Tropfenversatz zusätzlich das Durchmesser Verhältnis, die Materialeigenschaften der kollidierenden Tropfen sowie die Parameter der umgebenden Gasphase eingehen. Weitere Einflussfaktoren sind elektrische Ladungen der Tropfen sowie grenzflächenaktive Substanzen^[53,83]. Die Relevanz des Viskositätseinflusses auf die Kollisionsdynamik ist bekannt^[27], kann jedoch selbst bei rein viskosen Fluiden mit einem Kollisionsdiagramm nicht beschrieben werden. Eine Variation des Umgebungsdrucks führt zu einer Verschiebung

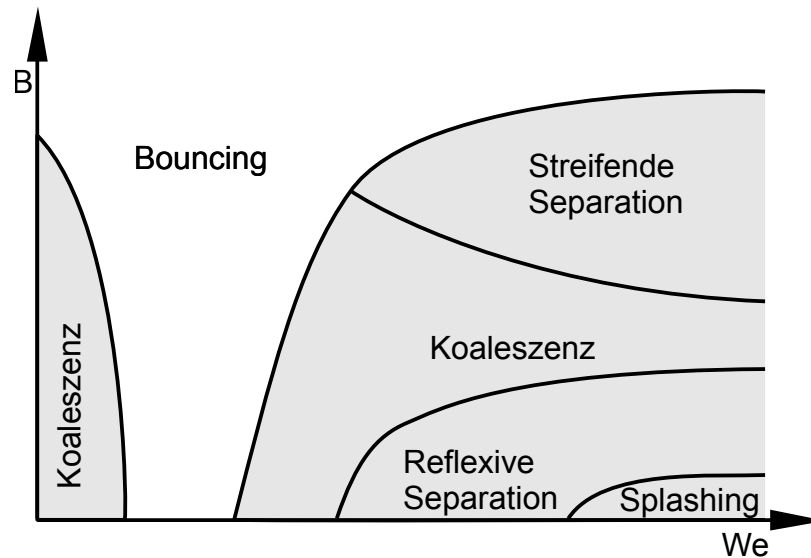


Abb. 1.5.: Schemadarstellung eines Kollisionsdiagramms. Kollisionstypen, die mit einer Direkten Numerischen Simulation prädiktiv erfasst werden können, sind grau unterlegt. Darstellung angelehnt an ^[5].

der Grenzkurven im Kollisionsdiagramm und kann beispielsweise zum Verschwinden des linken Koaleszenzregimes in Abbildung 1.5 führen ^[96]. In Anwendungen insbesondere zur Partikelherstellung treten Fluide mit nichtnewtonschen Fließeigenschaften auf, sodass hier die Rheologie der Flüssigphase berücksichtigt werden muss. In Sprühprozessen finden Kollisionen von Gemischtropfen mit unterschiedlichen Trocknungshistorien und folglich mit unterschiedlichem Gehalt an gelöstem Stoff statt, daher sind Kollisionen von Tropfen mit unterschiedlichen Flüssigkeitseigenschaften zu berücksichtigen. Um zu einer verbesserten Schließung der gemittelten Modellgleichungen und somit zu einer verbesserten simulativen Beschreibung des gesamten Sprühprozesses zu kommen, sind zusätzlich Informationen über die Geschwindigkeitsvektoren der resultierenden Tropfen nach der Kollision nötig ^[95].

Eine realitätsnahe Beschreibung von Tropfenpopulationen und ihrer Dynamik muss auf tiefgehendem Verständnis binärer Tropfenkollisionen als Elementarprozess aufbauen. An dieser Stelle setzt die vorliegende Arbeit an. Die Untersuchung binärer Kollisionen mittels Direkter Numerischer Simulation, d.h. unter Auflösung aller relevanten Zeit- und Längenskalen, liefert Einblicke in die Mechanismen der Tropfen-Tropfen-Wechselwirkung unter sprayrelevanten Bedingungen. Mittels mechanistischer Modellierung des Kollisionsausgangs können die Erkenntnisse der DNS in die skalenreduzierte Simulation des gesamten Sprühprozesses überführt werden. Alle Kollisionsregime, die mittels DNS prädiktiv erfasst werden können, sind in Abbildung 1.5 grau unterlegt. Der folgende Abschnitt gibt eine Übersicht über Direkte Numerische Simulationen binärer Tropfenkollisionen.

1.3 Numerische Untersuchungen von Tropfenkollisionen

Aufgrund des breiten Anwendungsspektrums sind binäre Tropfenkollisionen Gegenstand intensiver Forschung. Dank der stetigen Weiterentwicklung der Methoden kann der Kollisionsprozess sowohl experimentell als auch numerisch mit immer höherer räumlicher und zeitlicher Auflösung untersucht werden. Im Folgenden werden einige numerische Untersuchungen vorgestellt; weitere Arbeiten zu Tropfenkollisionen mit Relevanz für die vorliegende Arbeit werden am Anfang der jeweiligen Kapitel genannt. Ein Überblick zur Thematik gibt Brenn (2011)^[4].

Numerische Untersuchungen binärer Tropfenkollisionen werden von den nachfolgend aufgeführten Arbeitsgruppen auf Basis der Direkten Numerischen Simulation durchgeführt (DNS). Bei einer DNS werden alle relevanten Zeit- und Längenskalen aufgelöst und es sind, neben den Grundgleichungen der Fluidmechanik, keine weiteren Modelle notwendig.

Bouncing

Tryggvason et al.^[77,78] simulieren die Kollision von Tropfen, wobei das Abprallen der Tropfen als Ausgang der Kollision durch die Methode vorgegeben ist. Bei der genutzten Front-Tracking Methode ist die Position der Grenzfläche explizit durch einen Marker gegeben; der Marker wird auf einem ortsfesten Gitter transportiert. Topologieänderungen werden nicht automatisch erfasst; auf diese Weise kann Bouncing simuliert werden, ohne die Luftschicht zwischen den Tropfen aufzulösen. Koaleszenz kann simuliert werden, indem das Verschmelzen mit einem vorher definierten Kriterium ausgelöst wird^[77].

Pan und Suga^[88] stellen Simulationsergebnisse zu binären Tropfenkollisionen basierend auf der Level-Set Methode vor. Die Position der Phasengrenzfläche ist bei der Level-Set Methode durch das Null-Niveau einer vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion gegeben. Zur Validierung des numerischen Verfahrens werden Experimente von Qian und Law^[96] herangezogen und der Kollisionsausgang in Übereinstimmung mit den Experimenten vorhergesagt. Allerdings können die Ergebnisse nicht bewertet werden, da insbesondere für das Bouncing Regime Eingriffe notwendig sind, um es bei der verwendeten Auflösung zu erfassen. Diese Eingriffe werden jedoch nicht beschrieben.

Koaleszenz und Separation

Rieber und Frohn^[103] nutzen den Inhouse-Code FS3D für die Simulation von Tropfenkollisionen und können die Grenzen des Koaleszenz- und des Separationsregimes in guter Übereinstimmung mit Experimenten erfassen. Der Inhouse-Code

FS3D, der ebenfalls in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommt, beruht auf der Volume-of-Fluid Methode, bei der die Phasen durch ein Skalarfeld repräsentiert werden. Der Einfluss der Viskosität auf den Ausgang von Tropfenkollisionen wird von Gotaas et al.^[41] untersucht. Die entsprechenden experimentellen Ergebnisse sind ebenfalls dargestellt. Der Kollisionsausgang kann in Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen erfasst werden, womit Gotaas et al.^[41] gleichzeitig eine Validierung des Programmpakets FS3D für die Kollision newtonscher Tropfen vorstellen. Im Fall von Separation wird eine Abhängigkeit der Anzahl resultierender Tropfen von der Auflösung beobachtet. Dai und Schmidt^[27] nutzen eine Interface-Tracking Methode, d.h. ein bewegliches Gitter folgt der Phasengrenzfläche. Sie analysieren die Beiträge von kinetischer Energie und viskoser Dissipation für die maximale Deformation während einer Tropfenkollision. Die Ergebnisse zeigen, dass die maximale Deformation mit steigender Reynoldszahl zunimmt und diese Abhängigkeit bei großen Reynoldszahlen schwächer wird. Untersuchungen von Kollisionen scherverdünnender Tropfen werden von Wielage^[125] sowie Motzigemba et al.^[69] mit dem Programm FS3D durchgeführt. Die Kollisionen werden mit dem Zusammenprall newtonscher Tropfen verglichen, deren Viskosität dem Wert der scherverdünnenden Flüssigkeit bei Scherrate null entspricht. Die Ergebnisse zeigen, dass der Stoßkomplexdurchmesser im Fall der scherverdünnenden Flüssigkeit deutlich größer als im newtonschen Fall ist. Eine numerische Untersuchung von Kollisionen mit Separation wird von Tanguy und Berlemont^[118] mit der Level-Set Methode durchgeführt. Insbesondere der numerische Zerfall einer Pralllamelle wird beschrieben. In den von Tanguy und Berlemont untersuchten Kollisionen wird der Kollisionsausgang trotz des unphysikalischen Zerfalls der Pralllamelle in Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen erfasst. Eine Reihe von Untersuchungen von Tropfenkollisionen haben Nikolopoulos und Bergeles mit einem Inhouse-Code, basierend auf der Volume-of-Fluid Methode, durchgeführt^[72–75]. Der verwendete numerische Code verfügt über die Möglichkeit, das kartesische Gitter automatisch zu verfeinern und kann so relevante Bereiche höher auflösen, beispielsweise in der Nähe des Interfaces (adaptive Verfeinerung). Die Ergebnisse zeigen die Abhängigkeit der Satellitentropfenanzahl von der Weberzahl sowie die Verteilung der Tropfenflüssigkeit im Stoßkomplex^[72,73]. Einen Einblick in die Kollisionsströmung geben die dargestellten Geschwindigkeitsfelder und Energieverläufe^[74,75].

Splashing

Eine numerische Untersuchung mit dem Volume-of-Fluid Code FS3D zu Kollisionen mit dem Ausgang Splashing wird von Roth et al.^[109] vorgestellt. Die Instabilität des Randes sowie das Ablösen kleiner Sekundärtropfen wird qualitativ korrekt erfasst. Die Instabilitäten treten in der Simulation früher auf als im Experiment, sodass eine Vorhersage der Sekundärtropfenanzahl nicht möglich ist.

Forschungsbedarf bezüglich binärer Kollisionen in Sprays lässt sich aufteilen in die Gebiete Physik, Numerik und Kollisionsmodellierung.

Zusätzliche physikalische Gleichungen müssen in den DNS berücksichtigt werden, um den Einfluss unterschiedlicher Flüssigkeiten auf kollidierende Tropfen simulativ zu erfassen. Des Weiteren ist der Einfluss scherverdünnender sowie viskoelastischer Fließeigenschaften auf Tropfenkollisionen nicht vollständig verstanden. Kollisionen von Tropfen mit ungleicher Viskosität werden in Kapitel 6 untersucht. Der Einfluss scherverdünnender und viskoelastischer Fließeigenschaften auf die Dynamik von Tropfenkollisionen wird in den Kapiteln 7 und 8 betrachtet.

Die Erfassung dünner Fluidfilme in einer numerischen Simulation erfordert eine Weiterentwicklung der vorhandenen Methoden. Dünne Fluidfilme treten beispielsweise als Pralllamelle bei einer Tropfenkollision mit hoher kinetischer Energie auf. Beim Kollisionsausgang Bouncing existiert ein trennender Luftfilm, der aufgrund der Skalenunterschiede von Filmdicke und Tropfendurchmesser numerisch nicht erfasst werden kann. In Kapitel 4 wird beschrieben, wie der auflösungsbedingte Zerfall einer Pralllamelle vermieden werden kann.

Für Simulationen mit reduzierten Skalen werden Kollisionsmodelle benötigt, die den Ausgang binärer Tropfenkollision beschreiben. Ein Modell, welches im gesamten Parameterraum gültig ist, existiert nicht. In Kapitel 5 wird die Erweiterung eines mechanistischen Kollisionsmodells von Roisman et al. (2012)^[108] für Kollisionen mit signifikantem Viskositätseinfluss vorgestellt.

2 Kontinuumsmechanische Modellierung

Die Dynamik von Tropfen wird basierend auf der Kontinuumsmechanik als eine Zweiphasenströmung mit scharfer Phasengrenze modelliert. In den folgenden Abschnitten werden die Grundgleichungen der Fluidmechanik zuerst für einphasige und anschließend für zweiphasige Strömungen eingeführt.

Für eine Kollisionsströmung können folgende Annahmen getroffen werden: Es werden isotherme Strömungen von zwei Fluiden (Gas und Flüssigkeit) betrachtet. Die Fluide sind molekular nicht mischbar und haben eine konstante Dichte. Des Weiteren wird von einem nicht kontaminierten und vollständig mobilen Interface ausgegangen. Die Phasengrenzfläche wird mit vernachlässigbarer Massendichte, also ohne das Auftreten von adsorbierten Spezies modelliert. Es wird eine konstante Oberflächenspannung angenommen, folglich treten keine Marangoni-Strömungen durch Gradienten in der Oberflächenspannung auf und Oberflächenviskositäten werden ebenfalls nicht in Betracht gezogen.

2.1 Navier-Stokes Gleichungen

Die Dynamik von Tropfen wird basierend auf der Kontinuumsmechanik als eine Zweiphasenströmung mit scharfer Phasengrenze modelliert. Es werden isotherme Strömungen von molekular nicht mischbaren Flüssigkeiten mit konstanter Dichte betrachtet. Innerhalb der Phasen ergibt die Bilanzierung von Masse und Impuls die Navier-Stokes-Gleichungen

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.1)$$

$$\rho \partial_t \mathbf{v} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{S} + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

mit dem viskosen Spannungstensor

$$\mathbf{S} = \eta (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) \quad (2.3)$$

für newtonsche Fluide, wobei die Materialparameter abhängig von der jeweiligen Phase sind. Wenn eine Unterscheidung zwischen den verschiedenen Phasen notwendig ist, wird das tiefgestellte d (dispers) oder c (continuous) als Phasenindex

verwendet. So ist $\Omega_d(t)$ das zeitabhängige Gebiet des flüssigen Tropfens beziehungsweise der dispersen Phase, während $\Omega_c(t)$ das umgebende Fluid beziehungsweise die kontinuierliche Phase darstellt. Wenn verallgemeinerte newtonsche Flüssigkeiten betrachtet werden, ist die Viskosität η_d abhängig von den lokalen Schergeschwindigkeiten und wird nicht als konstant angenommen.

2.2 Modellierung viskoelastischer Fluide

Um viskoelastische Strömungen zu beschreiben, sind verschiedene Modelle verfügbar, von denen das Oldroyd-B Modell (auch Convected Jeffreys Model genannt) ein Prototyp ist^[82]. Dem Oldroyd-B Modell liegt ein mikro-mechanisches Strukturmodell, das sogenannte Feder-Hantel Modell, zugrunde. Jedes einzelne Polymerteilchen wird durch zwei Punktmassen, die über eine Hookesche Feder verbunden sind, modelliert. Viele dieser Teilchen sind in einer newtonschen Flüssigkeit verteilt. Unter der Annahme, dass jedes Teilchen nur mit der Flüssigkeit und nicht mit den anderen Polymermolekülen interagiert, kann das Oldroyd-B Modell hergeleitet werden.

Die Bewegungsgleichung für die beiden Hantelelemente mit der Masse m und den Ortskoordinaten \mathbf{r}_i lautet^[114]

$$m \frac{d}{dt} \left(\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_i) \right) = \mathbf{F}_i^{(r)} + \mathbf{F}_i^{(f)} + \mathbf{F}_i^{(b)}, \quad i = 1, 2. \quad (2.4)$$

Der Term auf der linken Seite beschreibt die Trägheitskraft mit der Geschwindigkeit des Lösemittels $\mathbf{u}(\mathbf{r}_i)$ am Ort \mathbf{r}_i und wird bestimmt durch die Reibungskraft $\mathbf{F}_i^{(r)}$, die Federkraft $\mathbf{F}_i^{(f)}$ und die Brownsche Kraft $\mathbf{F}_i^{(b)}$. Die Reibungskraft ist gegeben durch das Stokesche Gesetz^[84]

$$\mathbf{F}_i^{(r)} = -\zeta \left(\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_i) \right), \quad (2.5)$$

d.h. die Reibungskraft ist proportional zur Geschwindigkeitsdifferenz zwischen einer Punktmasse und der Lösung. Für den Reibungskoeffizienten gilt $\zeta = 6\pi\eta_s a$ mit der Solventviskosität η_s und dem Radius der Kugel a . Die Federkraft lautet

$$\mathbf{F}_i^{(f)} = -H \Delta \mathbf{r}_i, \quad (2.6)$$

mit der Federkonstante H der Hookeschen Feder und dem Verbindungsvektor zwischen den beiden Punktmassen $\Delta \mathbf{r}_i$. Die Brownsche Kraft berechnet sich gemäß

$$\mathbf{F}_i^{(b)} dt = \sqrt{2kT\zeta} d\mathbf{W}_i, \quad (2.7)$$

mit der Boltzmann Konstante k und der absoluten Temperatur T . Der Wiener-Prozess (auch als Brownsche Molekularbewegung bekannt) wird durch \mathbf{W}_i bezeichnet^[84].

Die Relaxationszeit λ und die Polymerviskosität η_p werden im Bezug auf die molekulardynamischen Parameter definiert gemäß

$$\lambda = \frac{\zeta}{4H}, \quad \eta_p = \frac{nkT\zeta}{4H} \quad (2.8)$$

mit der Teilchenanzahl n . Für eine ausführliche Herleitung wird auf Bird und Ole (1987)^[8], Owens und Phillips (2002)^[84] oder Heinen (2007)^[47] verwiesen.

In dem Oldroyd-B Modell wird der Spannungstensor \mathbf{S} in den Navier-Stokes Gleichungen durch einen zusätzlichen Spannungsterm erweitert,

$$\mathbf{S} = 2\eta_s D + \frac{\eta_p}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}), \quad (2.9)$$

wobei \mathbf{A} den sogenannten Konfigurationstensor darstellt^[8]. Dieser ist definiert als

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot (\nabla \mathbf{u})^\top + \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{A} - \frac{1}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}). \quad (2.10)$$

Dabei bezeichnet η_s den viskosen Anteil durch das Lösemittel (Solventviskosität), η_p die Polymerviskosität, D den Deformationsratentensor und λ die Relaxationszeit. Gleichung 2.10 bestimmt die Evolution der Polymermoleküle, deren gemittelte Eigenschaften durch den Konfigurationstensor \mathbf{A} repräsentiert werden.

Wird $1/\lambda$ in Gleichung 2.10 durch $1/(1 - \text{tr}(\mathbf{A})/L^2)$ ersetzt, ergibt sich das Finitely Extensible Nonlinear Elastic (FENE) Modell, bei der die Maximaldehnung L der Polymermoleküle berücksichtigt wird. Für $\eta_s = 0$ ergibt sich die Impulsbilanz des Upper Convected Maxwell (UCM) Modells; für $\eta_p = 0$ ergibt sich der newtonsche Fall.

2.3 Sprungbedingungen

Die Phasengrenzfläche (Interface) wird durch $\Sigma(t)$ dargestellt. Für Masse und Impuls sind am Interface entsprechende Transmissionsbedingungen erforderlich, die sogenannten Sprungbedingungen. Mit den oben beschriebenen Annahmen reduziert sich der Spannungstensor an der Phasengrenzfläche zu $\sigma (\mathbf{I} - \mathbf{n}_\Sigma \otimes \mathbf{n}_\Sigma)$ mit konstantem σ . Damit gelten die Sprungbedingungen

$$[[\rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}_\Sigma)]] \cdot \mathbf{n}_\Sigma = 0, \quad (2.11)$$

$$[[\rho \mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_\Sigma) + p\mathbf{I} - \mathbf{S}]] \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \sigma \kappa \mathbf{n}_\Sigma. \quad (2.12)$$

Die Notation der Sprungklammer $\llbracket \cdot \rrbracket$ bedeutet den Sprung einer Größe über die Phasengrenzfläche und ist definiert als

$$\llbracket \phi \rrbracket(x) = \lim_{h \rightarrow 0+} (\phi(\mathbf{x} + h\mathbf{n}_\Sigma(x)) - \phi(\mathbf{x} - h\mathbf{n}_\Sigma(x))). \quad (2.13)$$

Dabei ist \mathbf{v}_Σ die Grenzflächengeschwindigkeit und κ bezeichnet die Summe der lokalen Hauptkrümmungen der Phasengrenzfläche, gegeben durch

$$\kappa = -\nabla_\Sigma \cdot \mathbf{n}_\Sigma. \quad (2.14)$$

Gleichung 2.11 und 2.12 sind auch im Fall von Phasenübergang gültig. Es wird davon ausgegangen, dass das Zweiphasensystem kein Phasenübergang aufweist und somit keine konvektiven Flüsse über das Interface existieren. Folglich entspricht der Normalenanteil der Grenzflächengeschwindigkeit dem Normalenanteil der Geschwindigkeit der beiden angrenzenden Fluidgeschwindigkeiten, d.h. $V_\Sigma = \mathbf{v}_\Sigma \cdot \mathbf{n}_\Sigma$. Darüber hinaus wird angenommen, dass es keinen Schlupf zwischen den beiden Phasen an der Phasengrenze gibt, da beide Fluide Viskositäten größer null haben. Dann vereinfachen sich die Sprungbedingungen an der Phasengrenzfläche zu

$$\llbracket \mathbf{v} \rrbracket = 0, \quad (2.15)$$

$$\llbracket p\mathbf{I} - \mathbf{S} \rrbracket \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \sigma \kappa \mathbf{n}_\Sigma. \quad (2.16)$$

2.4 Einfeldformulierung

Bei bekannter Phasenverteilung ergibt sich eine Einfeldformulierung der Navier-Stokes-Gleichungen, in der die Grenzflächenspannung als Quellterm in den Impulsgleichungen wirkt. Somit gilt

$$\rho \partial_t \mathbf{v} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{S} + \rho \mathbf{g} + \sigma \kappa \mathbf{n}_\Sigma \delta_\Sigma, \quad (2.17)$$

wobei der Impulssprung mittels der Dirac-Delta Distribution δ_Σ eingebunden wird^[9].

3 Numerische Methode

3.1 Finite Volumen Diskretisierung

Die Bilanzierung einer extensive Größe Φ , also einer physikalischen Größe, die sich additiv verhält, wie z. B. Masse, Impuls oder Energie ergibt: Rate der zeitlichen Änderung von Φ = - Fluss von Φ über den Rand $\partial\Phi$ nach außen + Rate der Änderung von Φ durch Quellen oder Senken. Daraus lässt sich die die Transportgleichung für die Größe Φ herleiten. Für ein Kontrollvolumen CV ergibt sich die Erhaltungsgleichung für Φ in einphasiger Strömung zu

$$\int_{CV} \frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} dV + \int_{CV} \text{div}(\rho\Phi\mathbf{v}) dV = \int_{CV} \text{div}(\Gamma\text{grad}\Phi) dV + \int_{CV} S_{\Phi} dV. \quad (3.1)$$

Dies ist die Erhaltungsgleichung in einem ortsfesten Koordinatensystem; damit lassen sich Impuls-, Massen- und Energieerhaltung formulieren. Die Massenbilanz erhält man, indem $\Phi = 1$, $\Gamma = 0$ und $S = 0$ gesetzt wird; die Impulsbilanz für ein (generalisiert-) newtonsches Fluid erhält man mit $\Phi = \mathbf{v}$, $\Gamma = \eta$ und $S = -\nabla p + \rho g$. Anstelle der Volumenintegrale, die durch Anwendung des Gaußschen Divergenztheorems aus Oberflächenintegralen erhalten werden, kann die Bilanzierung der Flüsse auch direkt genutzt werden. So können Änderungsraten der Größe Φ aufgrund von Konvektion und Diffusion durch Flüsse über den Rand des Kontrollvolumens - also konservativ - beschreiben werden. Die Integration über einzelne Kontrollvolumen stellt den Grundgedanken der Finite-Volumen (FV) Diskretisierung dar.

3.2 Volume-of-Fluid Methode

Die numerischen Simulationen werden mit dem Zweiphasen-Navier-Stokes-Löser FS3D (Free Surface 3D) durchgeführt, der ursprünglich am Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR), Universität Stuttgart, entwickelt wurde^[102]. FS3D basiert auf der Volume-of-Fluid (VOF) Methode, die auf Arbeiten von DeBar^[28], Noh und Woodward^[79] sowie Hirt und Nichols^[51] zurückgeht. Der Code FS3D ist speziell konzipiert für die Untersuchung von Zweiphasenströmungen und wird sowohl am ITLR als auch im Institut für Mathematische Modellierung und Analysis (MMA) am Center of Smart Interfaces (CSI) erweitert. Einige Beispiele sind die

numerische Modellierung des Zerstäubungsprozesses in einem Ultraschall-Feld^[99], thermokapillare Strömungen^[62], Untersuchungen an Fallfilmen^[2] und der Stoffaustausch von Gasblasen ohne^[12] und mit^[13] chemischen Reaktionen. Auch wurden erste Untersuchungen mit nichtnewtonschem Fließverhalten durchgeführt^[69,125]. Das VOF-Verfahren löst die Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible, transiente Zweiphasenströmungen in Kombination mit den Sprungbedingungen, wobei auf die Einfeldformulierung, Gleichung 2.17, zurückgegriffen wird. Der Grundgedanke der VOF Methode ist es, die Interfaceposition implizit mittels einer Phasenindikatorfunktion zu erfassen, d.h. eine skalare Funktion $f = f(t, \mathbf{x})$ mit $f = 1$ in der dispersen Phase und $f = 0$ in der kontinuierlichen Phase zusätzlich zu bilanzieren.

Advektion des Phasenindikators

In Problemen ohne Phasenübergang führt die reine Advektion der Grenzfläche im Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} zur Transportgleichung

$$\partial_t f + \mathbf{v} \cdot \nabla f = 0. \quad (3.2)$$

Die konservative Formulierung der Advektionsgleichung im vorliegenden Fall inkompressibler Strömung, d.h. $\partial_t f + \nabla \cdot (\mathbf{v}f) = 0$ stellt die Massenerhaltung im Rahmen der Modellierung sicher; auf numerische Fehler wird im Weiteren eingegangen. Dies ist insbesondere wichtig, wenn das Langzeitverhalten von Lösungen untersucht werden soll; andere Methoden wie Level-Set oder Front-Tracking könnten dabei zu viel von dem Disperphasenvolumen verlieren. In der hier eingesetzten Finite-Volumen Diskretisierung entspricht der zellzentrierte Wert von f dem Phasenanteil in einer Zelle.

Geometrische Rekonstruktion und Advektion der Grenzfläche

Bei dem Transport der Flüssigkeit gemäß Gleichung 3.2 tritt ein Verschmieren des Interfaces auf, falls der zellzentrierte Wert des Phasenindikators für die Flussberechnung genutzt wird. In Abbildung 3.1 sind links die zellzentrierten f -Werte symbolisch dargestellt. Wenn diese Werte für den Transport genutzt werden, so existieren bereits nach wenigen Zeitschritten mehrere Zellschichten mit $0 < f < 1$. Ein solches Interface wird verschmiert genannt. Das Verschmieren einer Grenzfläche lässt sich verhindern, wenn der zu transportierende Anteil geometrisch bestimmt wird. Dazu muss das Interface zuerst rekonstruiert werden. Basierend auf den f -Werten kann eine Annäherung an die Interfacenormale berechnet werden gemäß

$$\mathbf{n}_\Sigma = \frac{\nabla f}{\|\nabla f\|}. \quad (3.3)$$

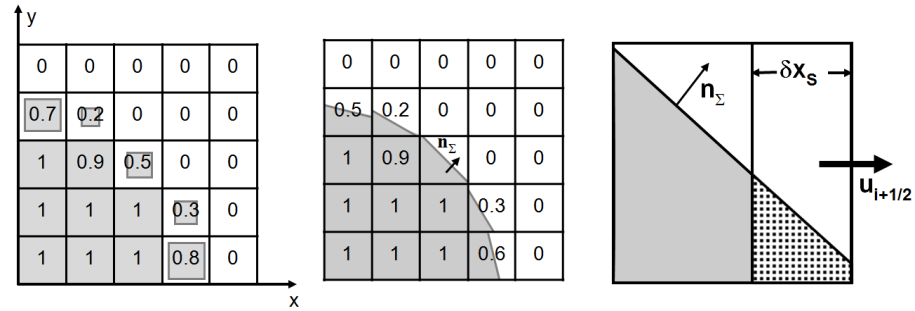


Abb. 3.1.: Rekonstruktion der Phasengrenzfläche und Advektion des Phasenindicators.

Der Phasenanteil der dispersen Phase, kombiniert mit der Interfacenormalen, erlaubt dann eine stückweise lineare Interface (Re-) Konstruktion, nach der sogenannten PLIC (Piecwise Linear Interface Re-(Construction)) Methode^[101], siehe Abbildung 3.1, Mitte. Damit werden wichtige Subgrid-Skala Information erhalten. Das rekonstruierte Interface ermöglicht nun einen konvektiven Transport des Phasenindicators ohne Verschmieren. Dies lässt sich mit dem rechten Bild in Abbildung 3.1 erklären: Während eines Zeitschrittes wird ein Volumenelement mit der Länge $\delta x_s = v_{i+1/2} \cdot dt$ in x-Richtung über die rechte Zellseite transportiert. Insgesamt beträgt der Fluss $\delta x_s \cdot dy \cdot dz$. Der Dispersphasenanteil innerhalb des transportierten Volumens kann mithilfe der PLIC-Rekonstruktion geometrisch bestimmt werden (gepunktet in Abbildung 3.1). Der Transport wird für jede Raumrichtung durchgeführt, wobei das sogenannte Richtungssplitting die dreidimensionalen Transportgleichungen durch eindimensionale Gleichungen ersetzt, deren Diskretisierung erheblich einfacher ist. Bei dem gesplitteten Transport - selbst bei einem exakt divergenzfreien Geschwindigkeitsfeld - wird das Flüssigkeitsvolumen leicht geändert. Die Änderung des Flüssigkeitsvolumens ist sehr gering, Rieber gibt eine Größenordnung der relativen Änderung von $\epsilon \leq 10^{-8}$ an^[102].

3.3 Bestimmung von Grenzflächentermen

Dichte- und Viskositätsmittelung

Die Materialeigenschaften ρ und η beziehen sich auf die phasenabhängigen Werte. Die lokalen Werte der Dichte werden bestimmt durch

$$\rho = \rho_d f + \rho_c (1 - f). \quad (3.4)$$

Die Berücksichtigung der Viskosität am Interface ist für verschiedene Komponenten des Stresstensors unterschiedlich. In FS3D kommt ein Staggered Grid (dt.: ver-

setztes Gitter) zum Einsatz, bei dem die Geschwindigkeiten auf den Zellseiten gespeichert werden, die übrigen Strömungsgrößen dagegen in den Zellmittelpunkten. Für Dehnströmungen wird eine zentrale Differenz der Geschwindigkeiten, die auf den angrenzenden Zellflächen gespeichert sind, ausgewertet. Für die Berechnung der Normalspannung wird daher eine Viskosität im Zellmittelpunkt benötigt. Diese wird aus der Viskosität der dispersen Phase und der kontinuierlichen Phase analog zu Gleichung 3.4 gemittelt. Spannungen aufgrund von Scherströmungen werden ebenfalls als eine zentrale Differenz von Geschwindigkeiten berechnet. Im Gegensatz zur Dehnströmung werden die Geschwindigkeiten an zwei Zellflächen, die auf einer Linie nebeneinander liegen, ausgewertet. Um die Off-Diagonal-Elemente des Stress-tensors zu ermitteln, wird die Viskosität auf den Zellecken ermittelt. Dazu werden zuerst die Zellviskositäten der angrenzenden vier Zellen analog zu Gleichung 3.4 berechnet. Anschließend werden Viskositäten an den Zellseiten als arithmetisches Mittel der benachbarten Zellwerte bestimmt (Abb. 3.2, links). Aus den vier Viskositätswerten wird jetzt ein harmonisches Mittel der jeweils gegenüberliegenden Zellseiten bestimmt, sodass nun an der Zellecke zwei Viskositätswerte zur Auswahl stehen (Abb. 3.2, rechts). Schließlich wird das Minimum als Viskosität an der Zellecke gewählt. Die Methode der arithmetischen Mittelung wurde dabei von der Berechnung von Wärmeleitung analog aus^[122] übernommen. Mit dieser Methode der Mittelung kann die Kronenbildung bei einem Tropfensplash von FS3D korrekt erfasst werden^[102].

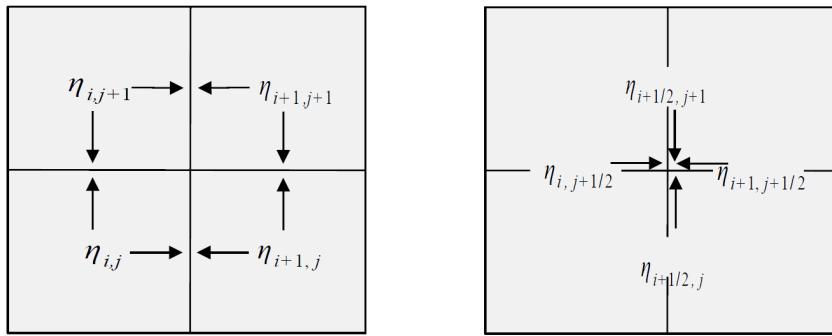


Abb. 3.2.: Schema der Viskositätsmittelung im Fall von Spannungen aufgrund von Scherströmungen.

Grenzflächenspannung

Die Dirac-Funktion wird numerisch mithilfe der Phasenindikatorfunktion realisiert,

$$\delta_{\Sigma} = \|\nabla f_s\|, \quad (3.5)$$

und ergibt nur in unmittelbarer Nähe zum Interface Werte ungleich Null. In Gleichung 3.5 wird f_s , eine geglättete Version des Phasenindikatorfeldes, genutzt. Der Drucksprung aufgrund von Oberflächenspannungskräften wird mit dem konservativen Continuum Surface Stress (CSS)-Modell^[57] bestimmt. Dabei wird die aus der Grenzflächenspannung resultierende Volumenkraft f_Σ gemäß

$$f_\Sigma = \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (3.6)$$

berechnet. Der Grenzflächenspannungstensor ist mit

$$\mathbf{T} = \sigma \delta_\Sigma [\mathbf{I} - \mathbf{n}_\Sigma \otimes \mathbf{n}_\Sigma] \quad (3.7)$$

gegeben. Gemäß Gleichung 3.3 wird n_Σ bestimmt, wobei das f -Feld vorher geglättet wird. Diese konservative Formulierung wird in der vorliegenden Arbeit verwendet.

Im Fall einer dünnen Fluidlamelle wird eine Modifikation vorgenommen, um den Zerfall der Lamelle zu verhindern. Diese Stabilisierung ist ausführlich im Kapitel 4 beschrieben.

Numerische Koaleszenz

Der Algorithmus des CSS-Modells glättet das f -Feld mit einem 27 Zellen Stencil (3^3 -Zellen). Anschließend wird die Divergenz des Kapillardrucktensors auf dem geglätteten Feld berechnet, wiederum unter Verwendung eines 27 Zellen Stencils, sodass die Oberflächenspannung in einer Zelle von insgesamt 125 Zellen (5^3 Zellen) beeinflusst wird. Wenn dieser Block aus 125 Zellen eine zusätzliche Grenzfläche enthält, wird die Berechnung der Oberflächenspannung der Zelle in der Mitte verändert. Dies kann zur numerischen Koaleszenz der benachbarten Grenzflächen führen, wenn der Abstand zwischen den Grenzflächen drei Zellen unterschreitet. Die benachbarte Grenzfläche könnte beispielsweise zu einem zweiten Tropfen gehören oder es könnte zu der gegenüberliegenden Seite des gleichen Tropfens gehören. Die simulierte Koaleszenz kann in Übereinstimmung mit dem physikalischen Verhalten sein, aber es ist auch möglich, dass die numerische Koaleszenz von benachbarten Grenzflächen zu nicht physikalischen Ergebnissen führt, z. B. zu dem Zerfall einer dünnen Pralllamelle, die bei einer zentralen Tropfenkollision mit hoher kinetischer Energie entsteht.

3.4 Algorithmus

Druck-Geschwindigkeitskopplung

Für die Bestimmung des Druck- und Geschwindigkeitsfeldes werden die Navier-Stokes-Gleichungen sowie die Kontinuitätsgleichung gelöst. Der Druck und die drei Komponenten des Geschwindigkeitsvektors kommen in dem System der drei Navier-Stokes Gleichung vor, in der Kontinuitätsgleichung ist von den Unbekannten lediglich die Divergenz der Geschwindigkeit enthalten. Spezielle Methoden sind nötig, um diese Gleichungen, bei denen Druck und Geschwindigkeit gekoppelt sind, lösen zu können. Eine Möglichkeit ist die Projektionsmethode nach Chorin^[20]. Die Navier-Stokes-Gleichungen werden nach der Geschwindigkeit aufgelöst, wobei die Zeitableitungen in Gleichung 2.17 mit $\frac{\mathbf{v}^{n+1}-\mathbf{v}^n}{\delta t}$ diskretisiert wird. Die Geschwindigkeit des alten Zeitschrittes wird mit Impulskonvektion, Impulsdiffusion und Oberflächenspannung aktualisiert. Die so erhaltene Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}$ ist nicht divergenzfrei; ein divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld wird durch Lösen der Poissongleichung,

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho(f^{n+1})} \nabla p^{n+1} \right] = \frac{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}}{\Delta t}, \quad (3.8)$$

und aufprägen der Druckbeschleunigung erhalten. Dieser Schritt wird auch Projektionsschritt genannt, da die Geschwindigkeit auf den Raum der divergenzfreien Geschwindigkeiten projiziert wird. Das Aufspalten der Navier-Stokes-Gleichung wird Operatorsplitting genannt. Diese Vorgehensweise ist ausführlich in Rieber (2003)^[102] beschrieben. Das Geschwindigkeitsupdate vor dem Projektionsschritt kann erweitert werden, ohne dass die Druck-Geschwindigkeitskopplung angepasst werden muss. So kann beispielsweise der Einfluss viskoelastischer Rheologie erfasst werden, indem vor dem Lösen der Druckpoisson-Gleichung ein Aktualisierungsschritt hinzugefügt wird.

Zeitschrittbeschränkung

In FS3D wird eine explizite Zeitdiskretisierung eingesetzt. Die Stabilität des Verfahrens wird durch eine Beschränkung der Zeitschrittgröße sichergestellt. Für die Berechnung der Tropfenkollisionen sind zwei unterschiedliche Stabilitätskriterien von Relevanz. In den frühen Stadien der Kollision wird die Zeitschrittweite durch die Courant-Bedingung

$$\Delta t_{\max} \leq \frac{\Delta x}{\|\mathbf{v}\|_{\max}} \quad (3.9)$$

bestimmt, da zu Beginn einer Tropfenkollision hohe Geschwindigkeiten herrschen. In den späteren Stadien wird die Zeitschrittweite durch den sogenannten viskosen Zeitschritt begrenzt, was zur Einschränkung

$$\Delta t_{\max} \leq \frac{\|\Delta x\|_{\min}^2}{2\eta} \quad (3.10)$$

führt. Eine weitere Einschränkung des Zeitschritts basiert auf der Geschwindigkeit kapillarer Oberflächenwellen, die in den hier betrachteten Strömungen aber nicht als begrenzender Faktor auftreten. Für weitere Details über das VOF-Verfahren wird der Leser auf^[110,113,131,133] verwiesen.

Randbedingungen

Die Randbedingungen werden in FS3D mittels zusätzlicher Randzellen, den sogenannten Dummy-Zellen, realisiert. Diese bilden zusätzliche Zellschichten am Rand des Rechengitters. Um Randbedingungen aufprägen zu können, werden die Feldgrößen über den Gitterrand hinaus fortgesetzt, indem entsprechende Werte in den Dummy-Zellen gesetzt werden. Auf diese Weise können Operatoren am Rand des Rechengebietes auf die gleiche Weise diskretisiert werden, wie im Inneren des Rechengebietes. Weitere Details finden sich in Blažek (2001)^[10].

Restart-after-Refinement Technik

Um den allgemeinen Fall der dezentralen Kollision ungleich großer Tropfen simulieren zu können, werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit zwei Verbesserungen erarbeitet und in FS3D implementiert. Die Stabilisierung dünner Fluidlamellen wird speziell für die Kollision von Tropfen entwickelt und wird in Kapitel 4 beschrieben. Die Restart-after-Refinement Technik ist allgemein anwendbar und nutzt die Tatsache, dass feine Strömungsstrukturen, verglichen mit der gesamten Dauer einer Simulation, nur kurz existieren. Ein Beispiel stellt das Auftreten einer dünnen Fluidlamelle bei einer Tropfenkollision dar. Die Restart-after-Refinement Technik ermöglicht eine zwischenzeitliche Verfeinerung des Gitters. Dazu wird der Tropfenstoß zuerst bis zum Auftreten der Lamelle mit relativ grober Auflösung simuliert. Bei Unterbrechung der Simulation zum Zweck der Verfeinerung werden alle Strömungsfelder in einer Restart-Datei gesichert. Anschließend wird eine neue Simulation in kleinerem Rechengebiet bei doppelt feinem Gitter mithilfe der Restart-Datei initialisiert. Dabei werden die Grobgitterdaten geeignet auf das feine Gitter übertragen. Insbesondere wird die Verteilung der Flüssigphase in den Grobgitterzellen mithilfe von PLIC rekonstruiert und damit konservativ unter Berücksichtigung von Subgrid-Skalen Information auf das feine Gitter übertragen. Gleichzeitig kann die Größe des

Rechengebiets angepasst werden. Die dann folgende hochaufgelöste Simulation wird beendet, sobald die Lamelle verschwunden ist. Anschließend kann mit einem gröberem Gitter der restliche Verlauf der Kollision berechnet werden. Mit dieser Technik ist eine erhebliche Einsparung an Rechenzeit möglich. Es hat sich jedoch gezeigt, dass diese Technik allein nicht ausreichend ist, um sehr dünne Lamellen, wie sie bei einer Tropfenkollision bei hohen Reynolds- und Weberzahlen vorkommen können, aufzulösen.

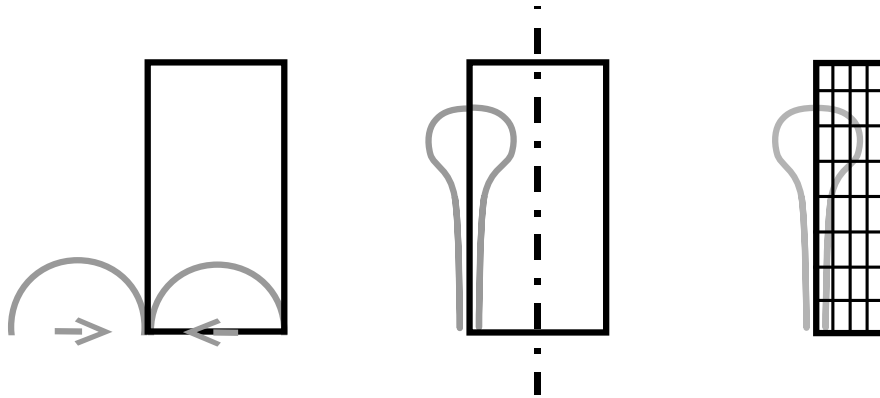


Abb. 3.3.: Links: Setup für eine zentrale Kollision, Mitte: Reduktion des Rechengebiets, rechts: Verfeinerung des Gitters.

Ausgabe der Energieanteile

Die Analyse des Energieverlaufs ermöglicht Einblicke in die Kollisionsdynamik von Tropfen. In einer Kollision von (generalisiert) newtonschen Tropfen treten die mechanischen Energiekomponenten kinetische Energie und Oberflächenenergie sowie die irreversibel in Wärme umgewandelte (dissipierte) Energie auf.

Die kinetische Energie ist definiert als

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m \|\mathbf{v}\|^2, \quad (3.11)$$

mit der Masse m , berechnet als Produkt von Zellvolumen und Dichte, die gemäß (3.4) ermittelt wird. Die Geschwindigkeitsanteile werden als arithmetisches Mittel der Zellflächenwerte in das Zellzentrum gemittelt, sodass dort der Betrag der Geschwindigkeit berechnet werden kann. Gleichung 3.11 wird für jede Zelle ausgewertet. Alle Zellwerte werden aufsummiert, um die gesamte kinetische Energie zu erhalten.

Die Oberflächenenergie E_{int} (int = interfacial) wird berechnet als

$$E_{\text{int}} = \sigma A, \quad (3.12)$$

wobei die Oberfläche A des Tropfens mittels $A = \int_V \|\nabla f\| dV$ berechnet wird. Anschließend erfolgt wieder die Summierung aller Zellwerte.

Die Berechnung der Dissipationsenergie kann nicht direkt aus den aktuellen Felddaten erfolgen. Mittels

$$\dot{E}_{\text{diss}} = \frac{1}{2} \int_V \eta \dot{\gamma}^2 dV \quad (3.13)$$

wird die Dissipationsrate berechnet. Die Scherrate $\dot{\gamma}$ wird über das Volumen V integriert. Die Dissipationsrate im Rechengebiet wird als Summe aller Zellwerte berechnet. Die in einem Zeitschritt dissipierte Energie ist das Produkt aus \dot{E}_{diss} und der Zeitschrittweite. Die bis zu einem Zeitschritt t_1 dissipierte Energie ist schließlich die Summe aus allen Zeitschritten, wobei die Dissipation zum Zeitpunkt t_0 null ist.

Alternativ könnte zur Berechnung der viskosen Dissipation der Energieerhaltungssatz genutzt werden. Dafür würde die Gesamtenergie zu Beginn der Kollision als Summe aus kinetischer und Oberflächenenergie berechnet werden. Anschließend kann die dissipierte Energie als Differenz der Gesamtenergie zu Beginn minus der aktuellen kinetischen- und Oberflächenenergie ermittelt werden. Die Vorgehensweise mit der direkten Berechnung der dissipierten Energie hat den Vorteil, dass die Gesamtenergie nicht konstant sein muss, d.h. es muss sich nicht um ein abgeschlossenes System handeln. In der vorliegenden Simulation existieren Ränder mit einer homogenen Neumann Bedingung für die Geschwindigkeit, folglich ist das System nicht abgeschlossen.

4 Lamellenstabilisierung

Im folgenden Kapitel wird die numerische Stabilisierung eines Fluidfilms beschrieben, der aufgrund der geringen Filmdicke in Simulationen nicht ausreichend aufgelöst werden kann. In einer Direkten Numerischen Simulation sollen alle relevanten Skalen aufgelöst werden; es werden keine vereinfachenden Gleichungen beispielsweise für die Berücksichtigung der Turbulenz genutzt. Die kleinste aufzulösende Skala ist abhängig von der Strömung. In turbulenten Strömungen ist die Skala des kleinsten Wirbels aufzulösen, die Abmessungen können mit der Kolmogorowschen Längenskala abgeschätzt werden. Die kleinste aufzulösende Skala ist diejenige Wirbelgröße, bei der die viskosen Kräfte den Trägheitskräften gleichen, sodass viskose Dissipation bedeutend wird. Die entsprechende Zeitskala entspricht der Zeit, in der die Energie dieses Wirbels dissipiert wird. Bei der Mischung von Flüssigkeiten kommt die Batchelor-Skala in Betracht. Sie ist definiert als die Ausdehnung einer Substanz, die sich innerhalb der Kolmogorowschen Zeitskala in dem umgebenden Fluid auflöst. Die entsprechende Zeitskala entspricht der Zeit, die eine Substanz mit der Ausdehnung der Kolmogorow-Skala benötigt, um durch Diffusion in dem umgebenden Fluid aufgelöst zu werden^[91].

In einer Zweiphasenströmung sind keine zusätzlichen Skalen dieser Art bekannt. Die Abmessung des dünnsten Filmes oder Ligaments ist als Skala nicht geeignet, da diese bei Topologieänderungen an den Kontakt- oder Zerfallsstellen zu null wird. Daher werden Gitterverfeinerungsstudien durchgeführt. Es wird davon ausgegangen, dass alle relevanten Skalen ausreichend aufgelöst sind, wenn sich die Strömung bei Berechnung auf einem feineren Gitter nicht mehr ändert. In diesem Fall wird von einer gitterunabhängigen Lösung gesprochen. Falls experimentelle Daten für eine ähnliche Problemstellung vorliegen, ergibt eine Vergleichsrechnung eine zusätzliche Sicherheit, dass alle relevanten Skalen tatsächlich aufgelöst sind.

4.1 Problematik

Experimente zeigen, dass bei Kollisionen, insbesondere bei hohen Weberzahlen, eine extrem dünne Fluidlamelle entsteht. Ein Zerfall dieser Palllamelle wird in binären Tropfenkollisionen nicht beobachtet^[5,36,96,118,127], wobei in den Experimenten Weberzahlen bis 2800 eingestellt wurden. Im Gegensatz zum physikalischen Verhalten wird in Simulationen der Zerfall der Lamelle vorhergesagt^[75,88,118]. Der Grund für den Zerfall ist die unzureichende räumliche Auflösung der Lamelle durch das Rechengitter.

Die Kollisionsdynamik wird durch den Zerfall der Pralllamelle erheblich gestört. In diesem Fall bleibt der Rand bestehen, während die Lamelle in viele kleine Fragmente zerfällt, siehe Abbildung 4.1. Wenn die Simulation ohne Lamelle fortgesetzt wird, sind die Rückstellkräfte deutlich reduziert, was zu falschen Ergebnissen führt. Abhängig vom Zerfallszeitpunkt dehnt sich der Rand weiter aus und zerfällt in kleine Tropfen oder der Stoßkomplex kontrahiert mit einer geringeren Geschwindigkeit und der Ausgang der Kollision wird nicht richtig vorhergesagt. Um den auflösungs-

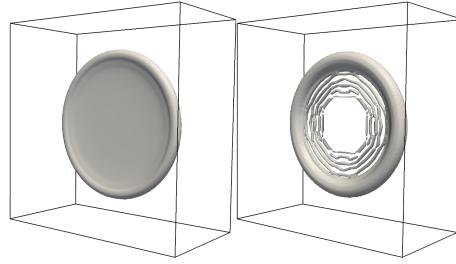


Abb. 4.1.: Stoßkomplex kurz vor und kurz nach dem auflösungsbedingten Zerfall der Pralllamelle.

bedingten Zerfall der Lamelle zu verhindern, muss die Lamelle mit mindestens vier Zellen in Richtung der Normalen aufgelöst werden.

Die Dicke einer Pralllamelle ist eine wichtige Größe für die mechanistische Modellierung von Tropfen. Für diese Größe kann auf eine Abschätzung von Roisman et al.^[107] zurückgegriffen werden. Die Abschätzung

$$h_{\text{lam}} \approx D_0 \frac{1.56}{(0.5 + t^*)^2} \quad (4.1)$$

ist gültig für die Kollision von zwei newtonschen Tropfen bei hoher Reynoldszahl, wobei die dimensionslose Zeit $t^* = t \cdot U_{\text{rel}}/D_0$ die Dauer bis zur Kontraktion des Stoßkomplexes, bei der die Lamelle verschwindet, beschreibt. Die erforderliche Zellenzahl soll nun am Beispiel einer zentralen Kollision von zwei gleichgroßen Tropfen beschrieben werden. Es wird eine Kollision mit einer Weberzahl von 1019 und einer Reynoldszahl von 115 ausgewählt. Ein entsprechendes Experiment ist in Willis und Orme (2000)^[126] beschrieben. Die Kontraktion des Stoßkomplexes endet nach $t^* = 22$, woraus sich mit Gleichung 4.1 eine Dicke von $1.7 \mu\text{m}$ ergibt. Mit einer erforderlichen Auflösung von 4 Zellen für die Lamellendicke beträgt die erforderliche Zellgröße $0.4 \mu\text{m}$. Die minimale Größe des Rechengebietes lässt sich mit der maximalen Ausdehnung des Kollisionskomplexes von $4.1D_0$ und der Verwendung von 3 Symmetrieebenen zu $2.05D_0 \times 2.05D_0 \times 1D_0$ bestimmen. Mit diesen Daten ergibt sich eine erforderliche Zellenzahl von etwa 9 Milliarden für ein äquidistantes kartesisches Gitter, was zu einem deutlich zu hohen Rechenaufwand führt. Ein möglicher Ausweg wäre eine adaptive Gitterverfeinerung, aber diese würde zu extrem kleinen

Zellen im Bereich der Lamelle mit entsprechend kleinen Zeitschritten führen. Außerdem wäre aufgrund der starken Dynamik des Prozesses eine häufige Neuvernetzung nötig, was ebenfalls einen hohen Rechenaufwand erfordert und zu Problemen mit der Massenerhaltung führen kann, da die Interpolation von Geschwindigkeitsfeldern nur in Sonderfällen divergenzfrei möglich ist. Außerdem ist eine effiziente Lastverteilung für parallele Simulationsrechnungen solcher hoch instationären Prozesse nicht trivial. Daher wird hier eine andere Idee verfolgt und eine Stabilisierung der Lamelle entwickelt.

Auf diese Weise können Tropfenkollisionen auf einem vergleichsweise groben Gitter simuliert werden, ohne dass es zum Zerfall der Pralllamelle kommt. Die erforderliche Auflösung ist somit nicht mehr durch die minimale Lamellendicke, sondern durch die kleinste Längenskala im Geschwindigkeitsfeld bestimmt. Durch Modifikation der Berechnung der Oberflächenspannung wird die unphysikalische Interferenz der zwei benachbarten Grenzflächen einer Lamelle, die sonst bei der Berechnung der Interfacenormalen und -krümmung auftritt, vermieden. Die Interferenz entsteht wie folgt: In FS3D wird die Oberflächenspannung mit dem Continuum Surface Stress Modell eingebunden. Der Algorithmus der CSS-Modells glättet das f -Feld mit einem 27-Zellen Stencil (3^3 Zellen). Anschließend wird die Divergenz des Grenzflächenspannungstensors auf dem geglätteten Feld berechnet, wieder unter Verwendung eines 27-Zellen Stencils, sodass die Oberflächenspannung in einer Zelle von 125 Zellen (5^3 Zellen) beeinflusst wird. Wenn dieser Block von 125 Zellen ein zusätzliches Interface enthält, wird die Berechnung der Oberflächenspannung in einer unphysikalischen Art beeinflusst. Dieses zusätzliche Interface könnte beispielsweise zu einem zweiten Tropfen gehören, oder es könnte zu der gegenüberliegenden Seite des gleichen Tropfens gehören.

Das Problem der Interferenz ist in Abbildung 4.2 am Beispiel eines Stoßkomplexes mit dem Rand (links) und der Lamelle (rechts) dargestellt. Für die mit * gekennzeichnete Zelle soll nun der Drucksprung aufgrund von Oberflächenspannung berechnet werden. In die Berechnung fließen alle Zellen innerhalb der gestrichelten Box ein und somit auch das Interface auf der Rückseite der Lamelle. Diese Interferenz im Bereich der Pralllamelle äußert sich mit dem Zerfall der Lamelle.

Es wurden zwei Algorithmen zur Stabilisierung der Lamelle entwickelt. Beide nehmen eine Korrektur der Oberflächenspannungsberechnung vor. Bei der zentralen Kollision gleichgroßer Tropfen wird die Symmetrie der Kollision für die Korrektur ausgenutzt, während bei der Stabilisierung im Fall dezentraler Kollisionen ungleichgroßer Tropfen eine Addition von Flüssigkeit zur Erhaltung einer Mindestdicke für die Korrektur notwendig ist.

4.2 Stabilisierung im Fall einer symmetrischen Kollision

Die zentrale Kollision zwei gleichgroßer Tropfen verläuft symmetrisch zur Prallebene. Um den Berechnungsaufwand zu minimieren, wird beim Setup in dieser

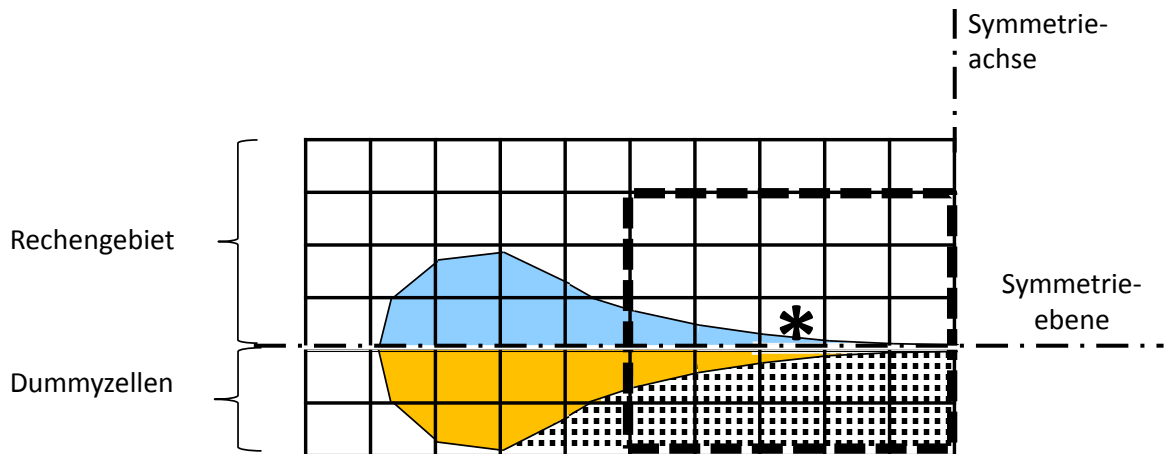


Abb. 4.2.: Schema der Stabilisierung. Die gestrichelte Box kennzeichnet die Größe des Stencils für die Berechnung der Oberflächenspannung.

Ebene eine Symmetrie-Randbedingung verwendet und damit das Rechengebiet halbiert. Dies ermöglicht eine Stabilisierung mittels Modifikation der Symmetrie-Randbedingung.

An einer Symmetriewand wird das f -Feld mittels Spiegelung auf die Dummy-Zellen fortgesetzt. Wenn das Interface den Rand des Rechengebiets schneidet, beispielsweise bei einer Sphäre, deren Mittelpunkt auf dem Rand liegt, sorgt diese Vorgehensweise für die korrekte Fortsetzung des Phasenindikatorfeldes. Im Fall einer Pralllamelle mit einer Dicke kleiner als vier Zellbreiten führt diese Vorgehensweise dazu, dass durch die Spiegelung eine Rückseite der Lamelle auf den Dummy-Zellen erzeugt wird. Abbildung 4.2 zeigt das originale f -Feld im oberen Bereich und die Spiegelung des f -Feldes auf den Dummy-Zellen im unteren Bereich. Diese f -Werte in den Dummy-Zellen werden nun durch den Algorithmus verändert, um die Störung der Krümmungsberechnung zu verhindern. Der Algorithmus wählt dazu den Lamellenbereich aus und füllt die Dummy-Zellen in dem Lamellenbereich auf, das heißt, der Variablen f wird der Wert 1 zugewiesen. Die Modifikation der f -Werte wird ausschließlich für die Berechnung des Drucksprungs aufgrund von Oberflächenspannung angewendet. In Abbildung 4.2 symbolisiert die gepunktete Fläche den Bereich der aufzufüllenden Dummy-Zellen. Die Stabilisierung wird in drei Schritten durchgeführt:

1. Alle Zellen in der ersten Schicht am Rand des Rechengebietes werden entweder als "Rand" oder "Lamelle" eingestuft. Eine Zelle ist ein Teil des Randes, wenn die Zelle eine Grenzflächenzellenzelle ist ($0 < f < 1$) und nicht alle benachbarten Zellen in dieser ersten Schicht Flüssigkeit enthalten. Zellen werden dem Lamellenbereich zugeordnet, wenn die Zelle selbst und alle benachbarten Zellen in dieser Schicht Grenzflächenzellen sind.

-
2. Die f -Werte in den Dummy-Zellen werden gespiegelt, wenn sie sich im Randbereich befinden, und sie werden aufgefüllt, wenn sie zum Lamellenbereich gehören.
 3. Der Wert des Phasenindikators kann sich durch den f -Transport verändern, allerdings erzwingt der Algorithmus einen minimalen f -Wert von $f = 1 \cdot 10^{-6}$, damit FS3D diese Zellen weiterhin als Grenzflächenzelle klassifiziert und diese in die entsprechenden Algorithmen wie zum Beispiel die Rekonstruktion mittels PLIC einbezieht.

Während der im Rahmen dieser Arbeit vorgenommenen Simulationen mit dieser Stabilisierung blieb der f -Wert in den Lamellenzellen über 10^{-6} , sodass es zu keiner Volumenänderung während der Lamellenstabilisierung kam. Folglich ist keine Masse zu dem Stoßkomplex hinzugefügt worden und auch die Impulsbilanz bleibt unberührt. Mit diesem Stabilisierungsalgorithmus kann der Zerfall einer Lamelle nicht vorhergesagt werden. Der Ansatz ist daher auf die Klasse von Tropfenkollisionen beschränkt, bei denen die Lamelle stabil bleibt. Aus Experimenten ist allerdings kein Fall einer Kollision von Flüssigkeitstropfen bekannt, bei dem die Lamelle zerfällt. Somit besteht ein breiter Anwendungsbereich für die Stabilisierung und sie ermöglicht die korrekte Vorhersage der Kollisionsdynamik von Tropfen.

Validierung

Der Code FS3D ist für newtonsche Zweiphasenströmungen umfangreich validiert, insbesondere für Tropfenkollisionen existieren viele Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen^[36,41,69,125]. Um den Algorithmus der Lamellenstabilisierung zu validieren, wird in Abbildung 4.3 die simulierte zeitliche Entwicklung des maximalen Durchmessers des Stoßkomplexes einer Tropfenkollision mit Experimenten verglichen. Der Testfall ist eine Kollision von zwei gleichgroßen Tropfen bei der Weberzahl 357 und Reynoldszahl 178. Die experimentellen Daten sind aus Willis und Orme (2003)^[127] entnommen. Die Simulation erfolgt mit einer Auflösung von $256 \times 256 \times 128$ Zellen mit Hilfe von drei Symmetrieebenen. Eine Übersicht des Setups findet sich in Tabelle A.1. Ein Zerfall der Pralllamelle tritt nicht ein, obwohl die Lamelle mit nur einer Zelle aufgelöst ist. Der maximale Durchmesser während der Kollision beträgt $940 \mu\text{m}$, die Lamellendicke beträgt $4.7 \mu\text{m}$. Das Ergebnis zeigt das Potenzial des gewählten Ansatzes; die Fluidlamelle wird stabilisiert und die Entwicklung einer newtonschen Tropfenkollision kann vorhergesagt werden. Abbildung 4.4 zeigt verschiedene Stadien der Kollision. Das Phasenindikatorfeld zeigt, dass die minimale Dicke der Lamelle nicht bei Erreichen des maximalen Durchmessers des Kollisionskomplexes entsteht, sondern gegen Ende der Kollision. Die Geschwindigkeitsfelder zeigen, dass die Strömung in der Lamelle in Richtung des Randes orientiert ist, solange die Lamelle existiert. Dieses Phänomen wurde erstmals von I. Roisman^[105] beschrieben.

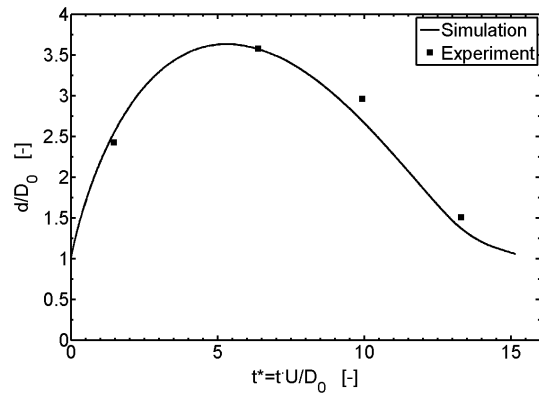


Abb. 4.3.: Evolution des Stoßkomplexes einer newtonschen Tropfenkollision, Simulation mit aktiver Stabilisierung und Experiment^[127].

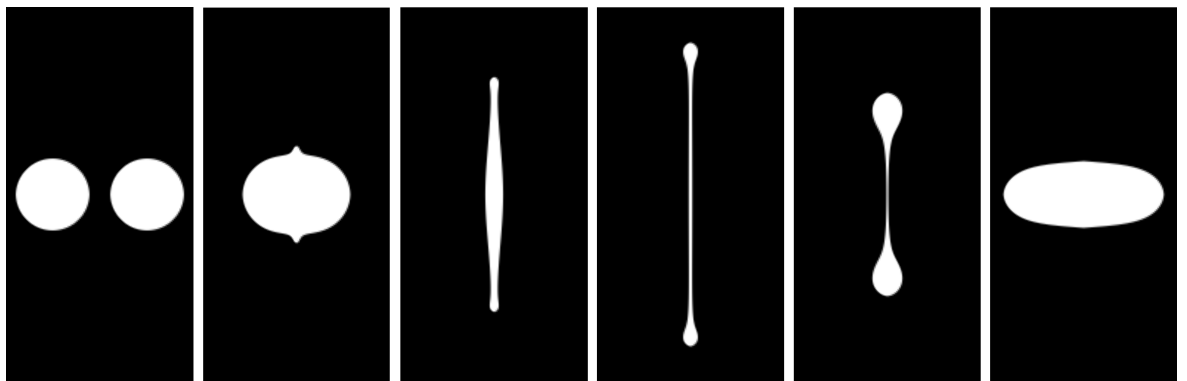


Abb. 4.4.: Simulationsergebnisse einer Kollision zweier Tropfen newtonscher Flüssigkeit bei $We = 357$ und $Re = 178$.

4.3 Stabilisierung im Fall einer asymmetrischen Kollision

Wie auch bei zentralen Kollisionen können im Fall dezentraler Kollisionen ungleich großer Tropfen dünne Pralllamellen entstehen. Aufgrund der Asymmetrie der Kollision befindet sich die Pralllamelle in diesem Fall nicht mehr auf einer Symmetrieebene, sodass der oben beschriebene Algorithmus nicht verwendet werden kann.

Daher wurde ein Stabilisierungsalgorithmus entwickelt, der es erlaubt, eine dezentrale Kollision ungleich großer Tropfen bei hohen Weberzahlen zu berechnen. Bei dem Verfahren wird eine minimale Dicke der Lamelle garantiert und anschließend werden die Kräfte der Oberflächenspannung ohne Wechselwirkung der beiden Lamellenseiten berechnet. Die Lamelle muss ungefähr rechtwinklig zur x-Achse orientiert sein, um die Stabilisierung verwenden zu können. Dies kann durch das folgende Verfahren erreicht werden:

1. Simulation der Tropfenkollision ohne Verwendung des Algorithmus zur Stabilisierung. In diesem Schritt ist ein feines Gitter nicht erforderlich.
2. Messung des Winkels zwischen der x-Richtung und der Lamelle, direkt bevor diese zerfällt.
3. Drehung des Setup mittels Multiplikation der Tropfenkoordinaten bzw. der Geschwindigkeitsvektoren mit einer Rotationsmatrix.
4. Durchführen der Simulation mit aktiver Stabilisierung.

Schritt 1: Garantieren einer minimalen Dicke der Lamelle

Um künstliche Wechselwirkungen der beiden gegenüberliegenden Seiten in der Berechnung der Oberflächenspannung im Lamellenbereich zu vermeiden, müssen die verschiedenen Seiten unterschieden werden. Der Algorithmus funktioniert wie folgt: Der Algorithmus analysiert alle Zellen, beginnt bei $x = 0$ mit Suchrichtung in positiver x-Richtung. Die erste Zelle, die ein Interface trägt, wird als "linke Lamellenzelle" markiert. Der Algorithmus läuft weiter und wenn eine Zelle, die nur Flüssigkeit enthält, erreicht wird, markiert er alle folgenden Interface-Zellen in x-Richtung als "rechte Lamellenzelle". Die Oberfläche der Flüssigkeit kann durch mehr als eine Interfacezelle repräsentiert werden, wenn die Oberfläche relativ zu den Zellflächen geneigt ist. Um dennoch die Klassifizierung der Zellen durchführen zu können, wird in der Mitte der Lamelle eine Zelle benötigt, die nur Flüssigkeit enthält. In der Nähe des Stoßkomplexrandes können ebenfalls die oben genannten Voraussetzungen einer Lamellenzelle erfüllt werden, daher müssen sie gesondert ausgeschlossen werden. Die Randzellen werden wie folgt identifiziert: Die f -Werte aller Zellreihen in

x-Richtung werden addiert. Das Ergebnis ist ein Feld in der yz-Ebene, das die Dicke des Kollisionskomplexes in x-Richtung beschreibt, siehe Abbildung 4.5. Der Außenbereich des Kollisionskomplexes wird als Bereich mit der Dicke null in x-Richtung beschrieben. Zellen, die an den Außenbereich des Kollisionskomplexes angrenzen, werden als Randzellen identifiziert. In der Darstellung in Abbildung 4.5 gehört die obere Reihe der Interface-Zellen zum Außenbereich, darunter befinden sich Lamellenzellen.

Die Lamelle muss eine Zelle enthalten, die nur Flüssigkeit enthält und während der Verformung und Bewegung der Lamelle kann dies nur garantiert werden, wenn die Lamellendicke nicht unter zwei Zellbreiten fällt. Um dies zu gewährleisten, wird die Dicke der Lamelle in x-Richtung ausgewertet und, wenn die Dicke auf weniger als zwei Zellen fällt, wird das Zentrum der Masse in x-Richtung berechnet. Anschließend werden die Interfacezellen der Lamelle ohne Änderung des Schwerpunktes etwas gefüllt. Dieses Verfahren beinhaltet zwei Unbekannte, die f -Werte in den Zellen $i+1$ und $i-1$. Zwei Bedingungen sind gegeben, um sie zu ermitteln. Zum einen muss die Dicke der Lamelle zwei Zellbreiten betragen und zum anderen darf das Zentrum der Masse nicht verschoben werden. Da die Zeitschritte aufgrund der Zeitschrittkriterien (siehe Kapitel 3.4) klein sind, ändert sich die Masse nicht sprunghaft, sondern steigt langsam an. Die Menge der zugefügten Flüssigkeit wird protokolliert und die Auswirkungen auf die Kollisionsdynamik werden im Folgenden im Detail diskutiert. In Abbildung 4.6 ist der Ort der Volumenaddition visualisiert. Dabei ist eine rippenförmige Struktur zu erkennen, die aufgrund der Gitterabhängigkeit der Addition entsteht. Neben der Gesamtzunahme wird auch der Ort der zugefügten Masse erfasst.

Schritt 2: Korrektur der Kräfte der Oberflächenspannung

Der zweite Schritt der Stabilisierung beginnt mit der Definition von zwei zusätzlichen f -Feldern. Diese Felder sind Modifikationen des ursprünglichen f -Feldes und enthalten nur auf einer Seite des Kollisionskomplexes eine Oberfläche, wie in Abbildung 4.7 dargestellt. Ein Feld, das nur auf einer Seite Interface enthält, erhält man, wenn man alle f -Werte auf der gegenüberliegenden Seite der Lamelle auf eins setzt. Die Kräfte aufgrund von Oberflächenspannung werden für die Felder berechnet, die nur auf einer Seite der Lamelle ein Interface besitzen und für das Originalfeld. Anschließend werden die Zellen des Kollisionskomplexes als Zellen auf der linken oder rechten Seite in dem Lamellenbereich oder als Rand-Zellen kategorisiert, wobei die gleichen Spezifikationen wie bei Schritt eins verwendet werden. Diese Kategorien werden verwendet, um die Felder mit den Oberflächenspannungskräften zu einem Feld zu kombinieren: Die Oberflächenspannungskräfte, die mit dem f -Feld erzeugt wurden, welches nur die linke Seite der Lamelle enthält, werden verwendet, wenn die Zellen kategorisiert sind als “links von der Lamelle”. Das Verfahren für die rechte

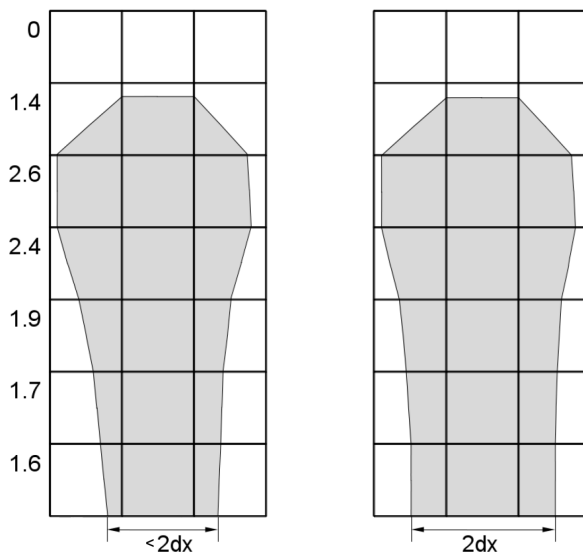


Abb. 4.5.: Die Lamellen-Zellen werden mit Flüssigkeit gefüllt, um eine Mindestdicke von zwei Zellbreiten zu erhalten. Die Zahlen auf der linken Seite stellen die Dicke des Kollisionskomplexes dar und werden verwendet, um die Regionen “Rand” und “Lamelle” zu unterscheiden.

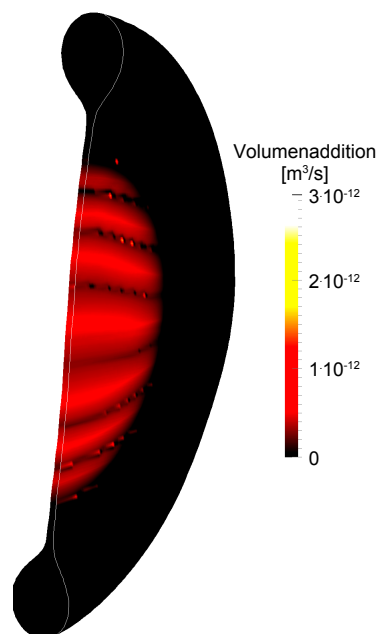


Abb. 4.6.: Ort der Volumenaddition bei einer zentralen Tropfenkollision mit einer Auflösung von 48 Zellen pro Durchmesser. Die rippenförmige Struktur ist parallel zu den Zellflächen orientiert.

Lamellenseite ist analog. Zellen in der Mitte der Lamelle müssen keine Oberflächenspannungskräfte zugeordnet werden, da diese Zellen kein Interface enthalten. In der Randzone werden die Kräfte genutzt, die mit dem ursprünglichen f -Feld erzeugt werden.

Dieses Vorgehen vermeidet die Interferenz der beiden Lamellenoberflächen in einer physikalisch sinnvollen Weise. Eine Vorhersage des Lamellenzerfalls ist mit dieser Modifikation nicht möglich, sodass der hier vorgestellte Ansatz auf Fälle beschränkt ist, bei denen die Stabilität der Lamelle bekannt ist, wie beispielsweise binäre Kollisionen von Flüssigkeitstropfen. Ein Vorteil dieses Verfahrens ist, dass die Reibungskräfte in der Lamelle mit den üblichen Verfahren berechnet werden können. Dies wäre nicht möglich, wenn die Lamellendicke weniger als eine Gitterweite betragen würde.

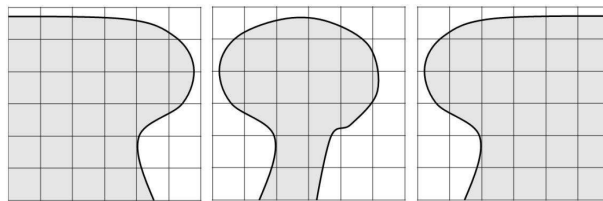


Abb. 4.7.: Schematische Darstellung der Lamellenstabilisierung, mittig: originales f -Feld mit dem Stoßkomplexrand im oberen Bereich und der Lamelle darunter, seitlich: f -Feld, welches für die Berechnung der Oberflächenspannung auf der rechten bzw. linken Lamellenoberfläche verwendet wird.

Validierung

Konfiguration 1

Im folgenden Abschnitt wird die Lamellenstabilisierung mit einer zentralen Kollision zweier gleichgroßer Tropfen und einer dezentralen Kollision validiert.

Die Simulation der zentralen Kollision wird mit Experimenten von Willis und Orme verglichen^[127]. Des Weiteren wird mit einer Simulation mit der Stabilisierung auf der Symmetrie-Ebene verglichen, bei der keine Flüssigkeit addiert wird (beschrieben im Abschnitt 4.2). Die Position der Tropfen und ihre Geschwindigkeitsvektoren werden um 5 Grad relativ zu den Koordinatenachsen des Rechengebiets geneigt, dargestellt in Abbildung 4.8. So wird verhindert, dass die Lamellenoberfläche exakt parallel zu den Gitterflächen ist. Abbildung 4.9 zeigt den maximalen Durchmesser des Kollisionskomplexes als Funktion der Zeit mit und ohne Stabilisierung durch FS3D. Die Kollision ist mit 8 Millionen Zellen aufgelöst, wobei eine Symmetrieebene verwendet wurde. Dies entspricht einer Auflösung von 48 Zellen/ D_0 . Ein Vergleich

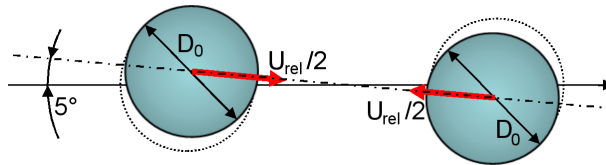


Abb. 4.8.: Setup der Tropfenkollision zur Validierung der Stabilisierung. Die Koordinaten der Tropfen sind um 5° relativ zu den Koordinatenachsen des Rechengebiets geneigt.

beider Simulationen zeigt, dass die weitere Kollisionsdynamik nach dem Zerfall der Lamelle stark gestört ist, da die Rückstellkräfte der Oberflächenspannung mit dem Zerfall der Lamelle verschwinden. Abbildung 4.10 zeigt die Entwicklung des Kollisi-

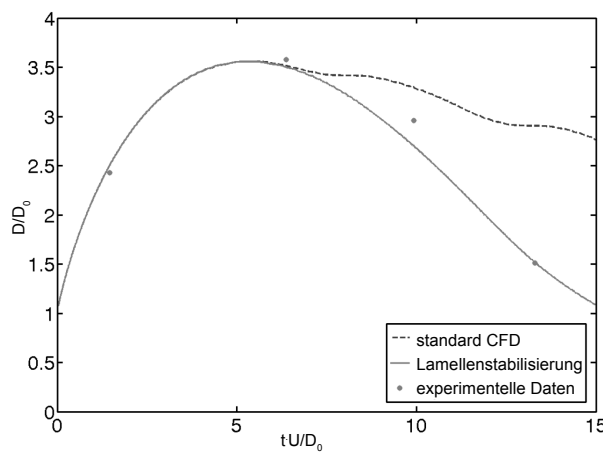


Abb. 4.9.: Evolution des Durchmessers des Stoßkomplexes mit und ohne Stabilisierung, verglichen mit experimentellen Daten von Willis und Orme (2003) ^[127].

onskomplexes mit und ohne Stabilisierung. Der Zerfall der Lamelle beginnt kurz nach dem Erreichen der maximalen Ausdehnung, die ersten Löcher in der Lamelle erscheinen zwischen Lamelle und Rand. Dies ist konsistent mit Roisman et al. ^[107], der die Geometrie einer Pralllamelle mit der Geometrie einer Gaußschen Glockenkurve vergleicht, bei der die maximale Dicke der Lamelle in der Mitte und die minimale Dicke in der Nähe des Randes ist. Die Geometrie einer Pralllamelle nach einer dezentralen Kollision ist in Bild 4.13 dargestellt.

Gitterstudie

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Auflösung auf die Vorhersage der Kollisionsdynamik mit dem Algorithmus zur Stabilisierung untersucht. Die erste Validierung ist eine zentrale Kollision von zwei gleichgroßen Tropfen, zu der experimentelle

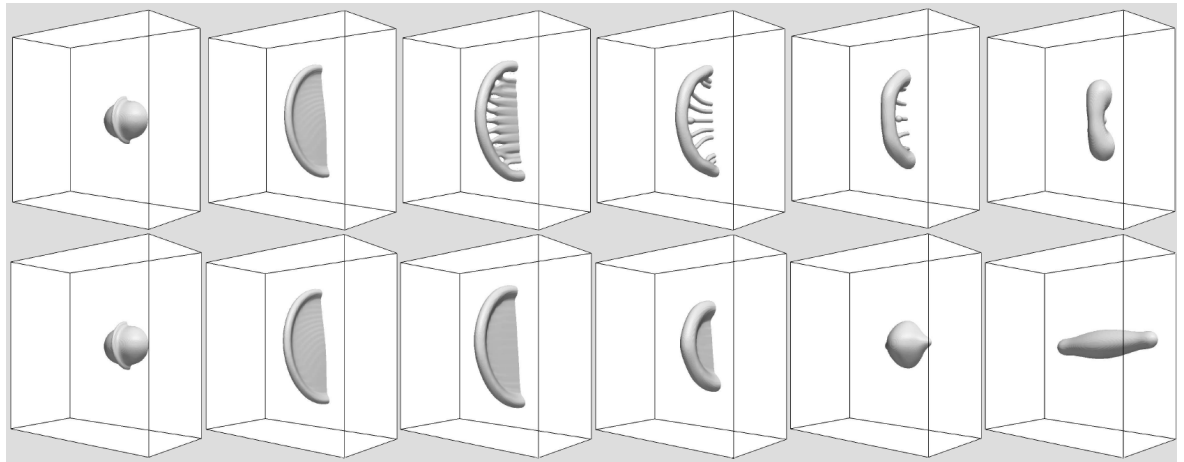


Abb. 4.10.: Geometrie des Kollisionskomplexes. Obere Reihe: standard VOF-Simulation; darunter: VOF-Simulation mit Stabilisierung.

Daten von Willis und Orme^[127] zu Verfügung stehen. Abbildung 4.11 zeigt die Entwicklung des maximalen Durchmessers des Stoßkomplexes als Funktion der Zeit für unterschiedliche Auflösungen. In dem grob aufgelösten Fall wird die Kollision mit 1.0 Millionen Zellen aufgelöst, was 24 Zellen/ D_0 entspricht. In diesem Fall werden 34.8 % Masse hinzugefügt. Abbildung 4.11 zeigt, dass die Kontraktion des Kollisionskomplexes zu langsam ist im Vergleich zu den Experimenten. Diese Abweichung wird durch die Trägheit der hinzugefügten Masse verursacht. Der zweite Fall wird mit 8.4 Mio. Zellen aufgelöst, das entspricht 48 Zellen/ D_0 , wobei 3 % Masse hinzugefügt werden, um die Lamelle stabil zu halten. Der dritte Fall ist mit 67 Millionen Zellen aufgelöst (96 Zellen/ D_0), wobei 0.07 % Masse hinzugefügt werden. Eine Übersicht über das Setup befindet sich in Tabelle A.2. Als Referenzfall wird eine Simulation mit einer speziellen Stabilisierung auf der Symmetrie-Ebene genutzt, wobei keine Masse addiert wird (siehe Abschnitt 4.2). Die Abweichung in Bezug auf den maximalen Durchmesser des Kollisionskomplexes ist in der Tabelle 4.1 zusammengefasst. Um zu überprüfen, ob der Algorithmus durch eine Neigung der Lamelle senkrecht

| Gitter [Zellen] | Auflösung [Zellen/ D_0] | addierte Masse [%] | Abweichung vom Referenzfall [%] |
|--------------------|-------------------------------|-----------------------|------------------------------------|
| 128×128×64 | 24 | 34.8 | 4.14 |
| 256×256×128 | 48 | 3.0 | 2.11 |
| 512×512×256 | 96 | 0.07 | 0.98 |

Tabelle 4.1.: Daten der Gitterstudie.

zur x-Richtung beeinflusst wird, werden Simulationen mit einer Neigung von null Grad und fünf Grad verglichen. Das Ergebnis ist, dass die Neigung keine signifikante Auswirkung auf die Evolution hat. Bei null Grad Neigung werden 3.35 % Masse hinzugefügt, im Fall von fünf Grad werden 3.0 % Masse hinzugefügt. Die veränderte

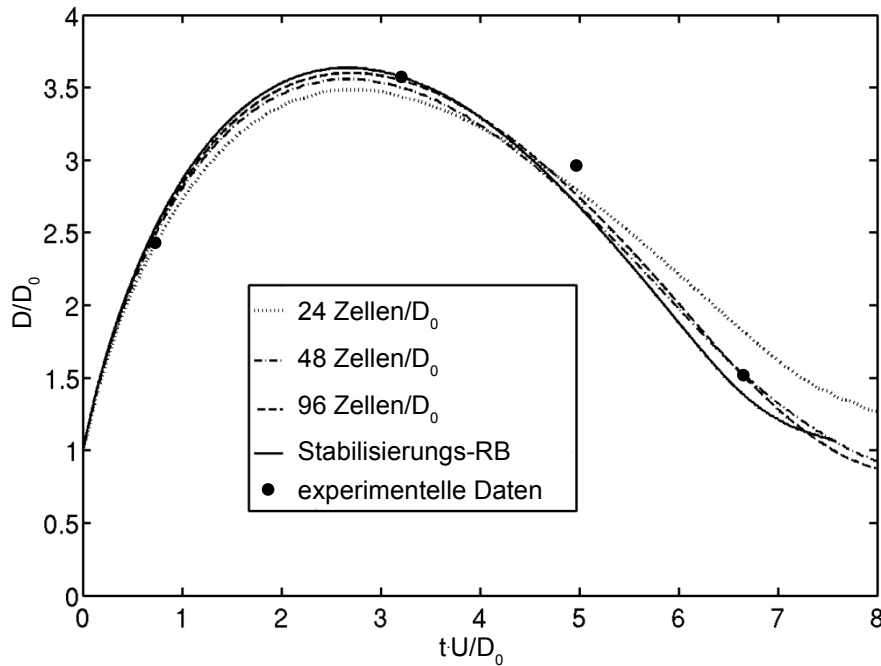


Abb. 4.11.: Gitterstudie zur Stabilisierung im Fall einer asymmetrischen Kollision im Vergleich mit experimentellen Daten^[127]. Zusätzlich sind Ergebnisse mit der Stabilisierung im Fall einer symmetrischen Kollision dargestellt.

Masse führt zu einer Änderung der maximalen Ausdehnung des Stoßkomplexes um 0.2 %.

Konfiguration 2

Die Lamellenstabilisierung wird durch Vergleich mit Experimenten von Qian und Law^[96] validiert. Die Auflösung der Simulation beträgt $512 \times 512 \times 256$ Zellen, das entspricht $166 \text{ Zellen}/D_0$. Tabelle 4.2 zeigt die maximale Ausdehnung des Kollisionskomplexes im Experiment von Qian und Law^[96]. Die berechnete Größe des Kollisionskomplexes durch FS3D zeigt eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Simulation zeigt, dass die dünne Pralllamelle der Kollision bei $t = 0.45 \text{ ms}$ entsteht und bei $t = 0.7 \text{ ms}$ verschwindet. Die Experimente von Qian und Law^[96] werden auch als Validierungsdaten von Nikolopoulos et al.^[75] verwendet. Trotz der Tatsache, dass eine adaptive Verfeinerung verwendet wird, zerfällt die Lamelle in ihren Simulationen. Tabelle 4.2 zeigt, dass die zerfallene Lamelle in^[75] zu einer starken Abweichung bei $t = 0.95 \text{ ms}$ führt, während die Vorhersage der Größe des Kollisionskomplexes gegen Ende der Simulation durch FS3D weniger Abweichung zeigt. Diese Ergebnisse müssen mit Vorsicht beurteilt werden, denn Nikolopoulos et al.^[75] schätzen die Genauigkeit der Messung des Durchmessers mit $0.3 D_0$ ein. Ein deutlicheres Ergebnis zeigt der Vergleich der Stoßkomplexgeometrie in Abbildung 4.12, in der die Vorhersage der Geometrie des Kollisionskomplexes

mit FS3D sowie die Ergebnisse von Nikolopoulos et al.^[75] und die experimentellen Ergebnisse von Qian und Law^[96] dargestellt sind. Die mit FS3D berechnete Stoßkomplexgeometrie zeigt eine kreuzförmige Geometrie, die auch im Experiment zu erkennen ist. Die von Nikolopoulos et al.^[75] berechnete Stoßkomplexgeometrie ist aufgrund des Lamellenzerfalls gestört und zeigt eine längliche Stoßkomplexgeometrie. Der Zusatz von künstlicher Masse durch den Stabilisierungs-Algorithmus ist in

| t [ms] | Experiment [D_{\max}/D_0] | Abweichung FS3D [%] | Abweichung der Simulation von Nikolopoulos et al. [%] |
|-----------|----------------------------------|------------------------|--|
| 0.10 | 1.54 | 1.5 | 1.6 |
| 0.50 | 2.28 | 11.1 | 8.6 |
| 0.73 | 2.43 | 5.5 | 0.0 |
| 0.95 | 2.27 | 0.6 | 7.0 |

Tabelle 4.2.: Maximale Ausdehnung des Kollisionskomplexes. Die Durchmesserangaben sind aus^[75] entnommen.

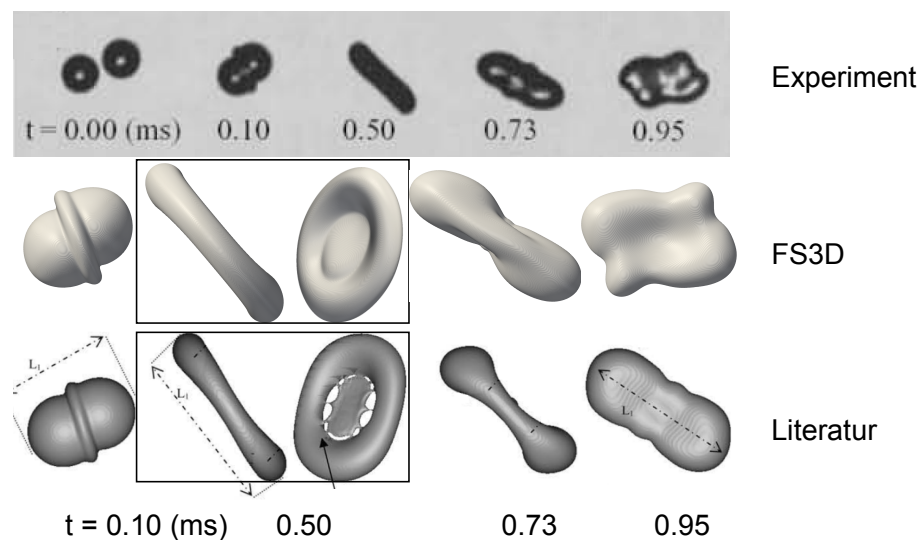


Abb. 4.12.: Experimentelle Daten von Qian und Law^[96] einer dezentralen Kollision von Wassertropfen (obere Reihe), Simulationsergebnisse mit FS3D mit dem Stabilisierungsalgorithmus (mittlere Reihe) und Simulationsergebnisse von Nikolopoulos et al.^[75] mit Hilfe einer adaptiven Gitterverfeinerung (untere Reihe).

Tabelle 4.3 aufgeführt. Selbst bei der maximalen Auflösung würde die Lamelle ohne Stabilisierung zerfallen.

Abbildung 4.13 zeigt die Geometrie der Lamelle, aufgelöst mit 8 Millionen Zellen und 70 Millionen Zellen. Die hohe Auflösung der Simulation zeigt, dass die minimale Dicke der Lamelle in der Nähe des Randes angeordnet ist. Dies ist der Grund, warum ein numerischer Zerfall an dieser Stelle beginnt. Die Anwendung des Stabilisierungs-

| Gitterzellen [–] | relative Massenzunahme [$\Delta m/m$] |
|-----------------------------|--|
| $64 \times 64 \times 32$ | 6×10^{-2} |
| $128 \times 128 \times 64$ | 5×10^{-3} |
| $256 \times 256 \times 128$ | 3.5×10^{-6} |
| $512 \times 512 \times 256$ | 1.1×10^{-6} |

Tabelle 4.3.: Flüssigkeitszunahme in der Simulation der dezentralen Kollisionen mit Stabilisierungsalgorithmus.

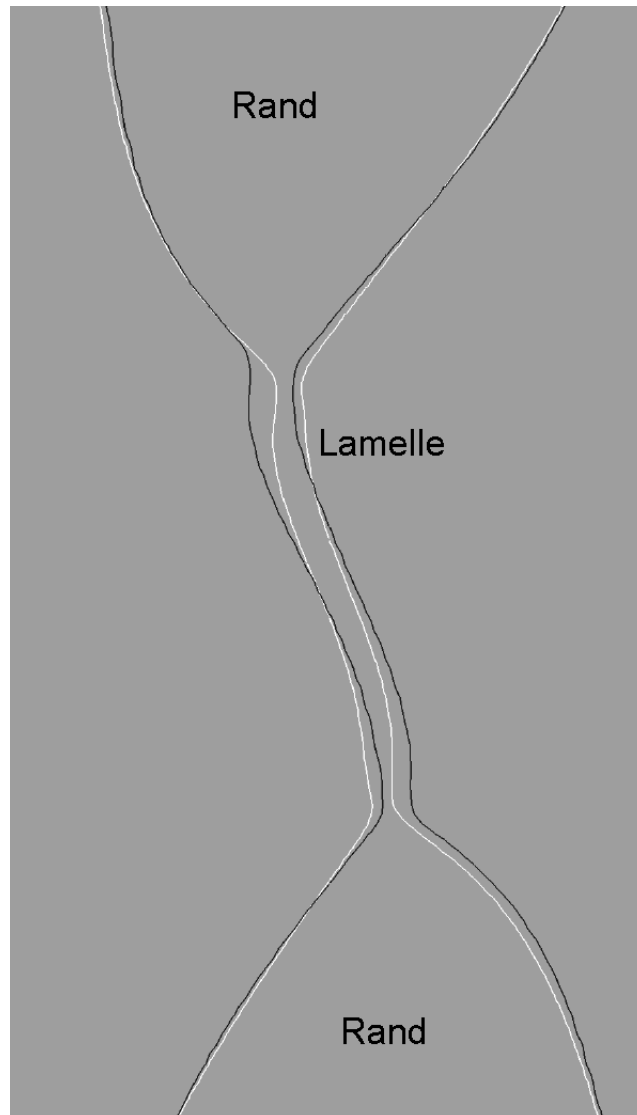


Abb. 4.13.: Geometrie der Lamelle bei $t = 66$ ms, simuliert mit 83 Zellen/ D_0 (schwarz) und 166 Zellen/ D_0 (weiß).

algorithmus für Lamellen ermöglicht es, die Dynamik von Tropfenkollisionen, bei denen eine dünne Pralllamelle auftritt, mit einem VOF-Code physikalisch sinnvoll zu erfassen.

Abbildung 4.14 verdeutlicht den Vorteil der Stabilisierung: Sie zeigt links eine Simulation ohne Stabilisierung, bei der zwei Tropfen aus der Kollision resultieren und in der Mitte das zugehörige Experiment (Prof. Sommerfeld, Martin Luther Universität Halle Wittenberg), bei der insgesamt drei Tropfen entstehen. Rechts ist das Simulationsergebnis mit Stabilisierung dargestellt. Der Kollisionsausgang wird nun richtig erfasst.

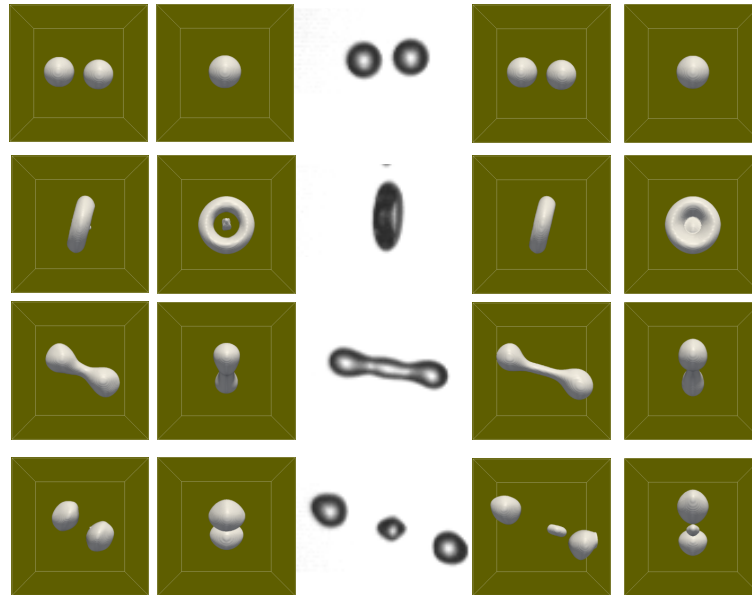


Abb. 4.14.: Evolution einer Tropfenkollision. Simulation ohne Stabilisierung (links), Experiment (Mitte) sowie Simulation mit Stabilisierung (rechts).

5 Mechanistische Modellierung der Kollision viskoser Tropfen

Ein langfristiges Ziel der Arbeit im Schwerpunktprogramms (SPP) 1423 “Prozess-Spray” ist die Herleitung mechanistischer Modelle zur Vorhersage der Kollisionsergebnisse. Diese können als Schließungsgleichungen in skalenreduzierten Simulationen wie Euler-Euler-oder Euler-Lagrange-Simulationen verwendet werden. In einem mechanistischen Modell wird die zugrunde liegende Kollisionsströmung vereinfacht erfasst, d.h. der Mechanismus der Kollision wird in dem Modell abgebildet. Die Näherungen können einzeln überprüft werden und der Gültigkeitsbereich des Modells entspricht dem Gültigkeitsbereich der Näherungen. Bei einem empirischen Modell dagegen ist der Gültigkeitsbereich nicht bekannt, folglich ist die Anwendung eines empirischen Modells mit einer großen Unsicherheit behaftet.

Stand der Technik zu Kollisionsmodellen

Ashgriz und Poo^[5] modellieren den Ausgang von Kollisionen von Wassertropfen. Als Datenbasis werden eigene Experimente genutzt, die in Kollisionsdiagramme eingeordnet werden, d.h. in Diagramme Weberzahl vs. Versatz, gültig jeweils für ein Stoffsystem und ein Durchmesser Verhältnis. In dem Modell von Ashgriz und Poo werden Vereinfachungen vorgenommen, beispielsweise die Vernachlässigung viskoser Dissipation mit der Begründung, dass kein signifikanter Einfluss auf den Ausgang der Kollision besteht. Mithilfe von Energie- und Kräftebilanzen wird ein Modell hergeleitet, welches den Ausgang der Kollisionen von Wassertropfen vorhersagen kann. Die zugrunde gelegten Strömungsregime sind stark vereinfacht; beispielsweise lautet das Kriterium für Zerfall, dass die kinetische Energie im System 75 % der Oberflächenenergie übersteigt. Eine Erweiterung des Modells durch Ko und Ryou (2005)^[56] ermöglicht die Vorhersage der Anzahl von Satellitentropfen auf der Basis eines empirischen Modells. Die von Brenn et al.^[14,16] vorgestellte Modellierung ermöglicht die Vorhersage von Anzahl und Größe von Satellitentropfen. Die Modellierung umfasst die (vereinfachte) Bilanzierung von Masse, Energie und Drehimpuls und ist anwendbar für zentrale und dezentrale Kollisionen von Tropfen mit gleichem Durchmesser. Einzelne Strömungsregime werden nicht betrachtet; der Einfluss der Viskosität wird vernachlässigt^[16] beziehungsweise über einen Anpassungsfaktor eingeführt^[14]. Ein detailliertes Kollisionsmodell unter der Berücksichtigung verschiedener Strömungsregime wird von Roisman^[105] vorgestellt und später von Pan und

Roisman^[87] revidiert. Munnannur und Reitz^[71] kombinieren Kollisionsmodelle aus der Literatur mit der Zielsetzung, ein geschlossenes Modell für alle Kollisionsausgänge zu erstellen. Mit den Modellen werden auch die entsprechenden Vereinfachungen übernommen, z. B. wird die viskose Dissipation pauschal mit 30 % der Gesamtenergie abgeschätzt. Zhang und Law^[135] stellen ein Modell für die Unterscheidung von Koaleszenz und Bouncing vor. Es gelingt, das nicht-monotone Verhalten Koaleszenz-Bouncing-Koaleszenz abzubilden; eine Vorhersage der kritischen Weberzahlen gelingt allerdings nicht.

Das Kollisionsmodell von Roisman et al. (2012)^[108] stellt den Ausgangspunkt für die mechanistische Modellierung in der vorliegenden Arbeit dar und wird daher im Folgenden ausführlich beschrieben.

Die Strömung in der Lamelle wird durch eine achsensymmetrische Strömung eines Flüssigkeitsfilms angenähert^[129,130]. Mit der Annahme, dass der Film dünn und unendlich ausgebreitet ist, ergeben Impuls- und Massenbilanz die Lamellendicke als Funktion von Radius und Zeit^[106],

$$h_L = \frac{\tau^2}{(t + \tau)^2} H_0 \left(-\frac{r\tau}{t + \tau} \right). \quad (5.1)$$

Die Funktion H_0 muss weiter spezifiziert werden. Gemäß Roisman et al. (2009)^[107] kann die Geometrie einer Lamelle durch eine Gaußsche Glockenkurve angenähert werden. Eingesetzt in Gleichung 5.1 ergibt sich

$$h_L = \frac{\Theta_1}{(t + \tau)^2} \exp \left[-\frac{6\Theta_2 r^2}{(t + \tau)^2} \right]. \quad (5.2)$$

Die als konstant angenommenen Parameter Θ_1 , Θ_2 und τ müssen durch den Vergleich mit experimentellen oder numerischen Daten bestimmt werden; Roisman et al.^[108] geben den Parametersatz $\Theta_1 = \Theta_2 = 0.39$ und $\tau = 0.25$ an.

Um die Dynamik des Randes zu erfassen, werden die Masse des Randes und der Impulsaustausch zwischen Lamelle und Rand bilanziert. In die Impulsbilanz gehen die Trägheit des Randes, die Reibung aufgrund der Strömung in der Lamelle, die Oberflächenspannungskraft sowie die Trägheit der in den Rand fließenden Lamellenflüssigkeit ein. Damit ergeben sich die Gleichungen

$$\dot{m}_R = 2\pi R \rho h (v_r - \dot{R}), \quad (5.3)$$

$$m_R \ddot{R} = 2\pi R \rho h (v_r - \dot{R})^2 - 4\pi R \sigma - 12\pi R h \frac{\eta}{t + \tau}, \quad (5.4)$$

mit dem Radius R , der als Abstand des Kollisionszentrums zur Mitte des Randes definiert ist, der Masse des Randes m_R , der radialen Komponente der Geschwindigkeit

der Lamellenflüssigkeit ν_r und der Viskosität der Flüssigkeit η . Der Reibungsterm ergibt sich aus der Analyse der Filmströmung. Eine Prinzipskizze ist in Abbildung 5.1 dargestellt.

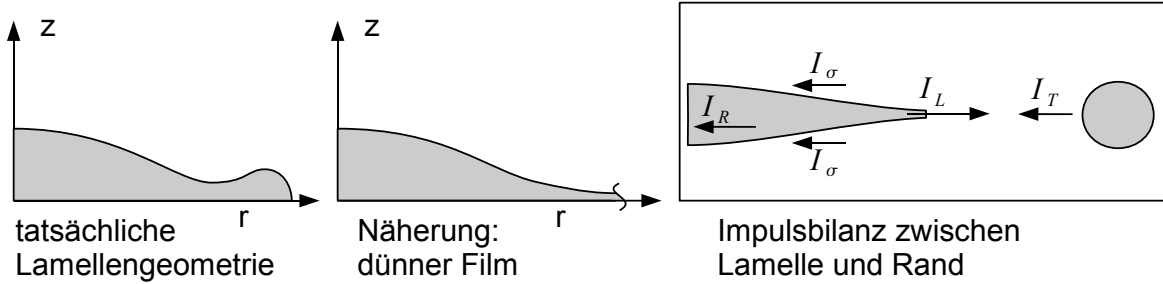


Abb. 5.1.: Modell von Roisman et al.^[108] für Tropfenkollisionen. Die Geometrie eines Stoßkomplexes einer binären Tropfenkollision (links) wird durch einen sich ausbreitenden dünnen Film beschrieben (Mitte). Die Dynamik des Randes ergibt sich durch den Impulsaustausch zwischen Lamelle und Rand (rechts). In die Impulsbilanz gehen die Reibung I_η , die Oberflächenspannung I_σ , die Trägheit der Lamellenflüssigkeit I_L und die Trägheit des Randes I_T ein.

Aus der Bilanzgleichung für den Impuls (Gl. 5.4) ergibt sich eine gewöhnliche Differenzialgleichung für den Radius. Diese lautet

$$\frac{V_R}{4\pi R} \ddot{R} = h_L \left[\frac{R}{t + \tau} - \dot{R} \right]^2 - \frac{12h_L}{\text{Re}(t + \tau)} - \frac{4}{\text{We}} \quad (5.5)$$

in entdimensionalisierter Form mit dem Randvolumen V_R , dessen Berechnung in Kapitel 5.1 erläutert wird. Die Differentialgleichung kann numerisch gelöst werden, wenn die Anfangsbedingungen für den Radius R und dessen Ausbreitungsgeschwindigkeit \dot{R} bekannt sind. Bei der Herleitung wurde die Näherung benutzt, dass der Randradius viel kleiner als der Stoßkomplexradius ist. Unter der Annahme einer Torusform für den Rand ergibt sich der Randradius a zu

$$a = \sqrt{\frac{V_R}{2\pi^2 R}}. \quad (5.6)$$

Der Durchmesser des Stoßkomplexes beträgt $D = 2(R + a)$.

Die Differenzialgleichung (5.5) kann die Entwicklung des Stoßkomplexdurchmessers einer zentralen Kollision vom ersten Kontakt bis zum Ende der Kontraktionsphase vorhersagen, wobei die Gleichungen in Roisman et al. (2012)^[108] für den 3-phasigen Fall hergeleitet werden. Ein Nachteil des Modells ist die Unterschätzung der viskosen Effekte, d.h. für moderate Reynolds- und Weberzahlen ist das Modell

nicht geeignet. Ausgehend von der Durchmesserrevolution kann das Kollisionsergebnis vorhergesagt werden. Entsprechende Ansätze werden in Roisman (2004)^[105] vorgestellt.

5.1 Modellerweiterung

Der Grund für die oben genannten Abweichungen zwischen Modellergebnissen und der tatsächlichen Kollisionsdynamik liegt in der Beschreibung der Lamellendicke als Funktion von Radius und Zeit. Die Lamellendicke (Gl. 5.2) geht in die Berechnung der Kollisionsdynamik ein, wobei im originalen Modell $\Theta_1 = \Theta_2$ gilt. Eine Variation der Reynoldszahl, beispielsweise von 100 bis 300 bei einer Weberzahl von 200, führt beim ursprünglichen Modell zu einer Änderung des maximalen Durchmessers von 0.03 %. Simulationen zeigen, dass die Durchmesserdivergenz aufgrund der Reynoldszahlvariation bei dieser Konfiguration 20 % beträgt. Der Einfluss der Viskosität kann im Originalmodell nicht mit ausreichender Genauigkeit vorhergesagt werden.

Das Modell wird erweitert, indem die ursprünglich vorhandenen unterschiedlichen Θ_i genutzt werden, um Lamellendicke und Dickenevolution getrennt zu beschreiben. Der erste Teil von Gl. 5.2 beschreibt die zeitliche Entwicklung der Lamellendicke, der zweite Teil beschreibt die Geometrie der Lamelle. Das dimensionslose Volumen des Randes V_R muss neu bestimmt werden, damit die Massenerhaltung (Gl. 5.3) weiterhin gewährleistet ist. Das Volumen des Randes wird berechnet gemäß

$$V_R = \frac{2\pi}{6} - 4\pi \int_0^R r h_L(r) dr = \frac{\pi}{3} + \frac{\pi\Theta_1}{3} \left(\frac{1}{\Theta_2} - \frac{1}{(t + \tau)^2} \exp \left[\frac{6R^2\Theta_2}{(t + \tau)^2} \right] \right). \quad (5.7)$$

Mit dieser Erweiterung wird das Modell an Kollisionen mit einem signifikanten Einfluss der Viskosität angepasst. Die Dynamik von Kollisionen mit Reynoldszahlen und Weberzahlen im Bereich von 100 - 300 werden untersucht. Die beiden Parameter Θ_i werden getrennt bestimmt, indem Θ_1 an die Dickenevolution angepasst wird und Θ_2 an die Geometrie der Lamelle.

Zuerst erfolgt eine quantitative Validierung des erweiterten Modells. Dazu werden die Parameter des Modells mithilfe numerischer Simulationen der vollen zeitlichen Entwicklung der Kollisionen bestimmt. Die mit dem Modell vorhergesagte Kollisionsdynamik wird anschließend mit der per DNS berechneten Kollisionsdynamik verglichen. Der zweite Schritt ist eine hybride Modellierung. Dazu werden Daten aus der Simulation der Anfangsphase als Input für das Modell verwendet. Die weitere Kollisionsdynamik wird anschließend mit dem Modell berechnet.

5.2 Validierung

Erzeugen einer Datenbasis

Für die Validierung werden Simulationen zentraler Kollisionen gleichgroßer Tropfen durchgeführt. Der Anfangsdurchmesser der Tropfen beträgt 1 mm, die Relativgeschwindigkeit beträgt 1 m/s. Reynolds- und Weberzahl werden mittels Variation von Viskosität und Oberflächenspannung eingestellt. Eine Übersicht über die Variation der Materialwerte gibt Tabelle 5.1.

| <div>Reynoldszahl Weberzahl</div> | 100 | 200 | 300 |
|---------------------------------------|---|--|---|
| 100 | $\sigma = 10 \text{ mN/m}$ $\eta = 10 \text{ mPa s}$ | $\sigma = 10 \text{ mN/m}$ $\eta = 5 \text{ mPa s}$ | $\sigma = 10 \text{ mN/m}$ $\eta = 3.33 \text{ mPa s}$ |
| 200 | $\sigma = 5 \text{ mN/m}$ $\eta = 10 \text{ mPa s}$ | $\sigma = 5 \text{ mN/m}$ $\eta = 5 \text{ mPa s}$ | $\sigma = 5 \text{ mN/m}$ $\eta = 3.33 \text{ mPa s}$ |
| 300 | $\sigma = 3.33 \text{ mN/m}$ $\eta = 10 \text{ mPa s}$ | $\sigma = 3.33 \text{ mN/m}$ $\eta = 5 \text{ mPa s}$ | $\sigma = 3.33 \text{ mN/m}$ $\eta = 3.33 \text{ mPa s}$ |

Tabelle 5.1.: Parameterstudie für die Validierung des mechanistischen Kollisionsmodells.

Die Simulationen werden mit 3 Symmetrieebenen bei einer Rechengebietsgröße von $2.4 \times 2.4 \times 1.2 \text{ mm}^3$ mit einer Auflösung von 102 Zellen/ D_0 durchgeführt. Um den Zerfall der Lamelle zu vermeiden, wurde die in Kapitel 4.2 beschriebene Stabilisierung verwendet. Die Gitterabhängigkeit bei $Re = 200$ und $We = 200$ wurde getestet, eine Simulation mit halber Auflösung ergibt eine maximale Abweichung von weniger als 1 % bezogen auf den maximalen Durchmesser.

Validierung des erweiterten Modells

Im Folgenden soll untersucht werden, inwiefern Gleichung 5.2 die Evolution der Lamellendicke wiedergeben kann und welche Werte Θ_1 und τ annehmen. Zu diesem Zweck wird Gl. 5.2 in eine Geradengleichung umgeformt,

$$\frac{1}{\sqrt{h_L}} = \frac{1}{\sqrt{\Theta_1}}(t + \tau), \quad (5.8)$$

wobei die Lamellendicke im Zentrum ($r = 0$) betrachtet wird. Abbildung 5.2 zeigt die Entwicklung der Lamellendicke für die Kollision bei $Re = 200$ und $We = 200$.

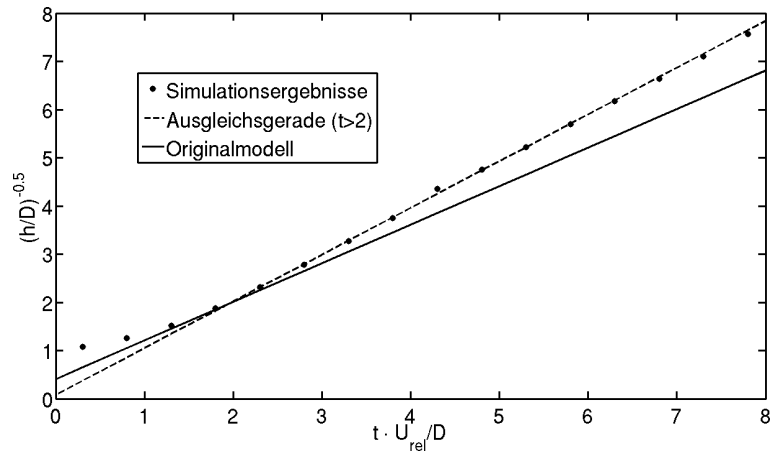


Abb. 5.2.: Evolution der Lamellendicke.

Durch die Umformung in eine Geradengleichung ist die Güte der Approximation gut zu erkennen. Die Simulationsergebnisse der Lamellendicke sind nahezu linear angeordnet; für $t^* < 2$ ist eine Abweichung vom linearen Verlauf zu erkennen ($t^* = t \cdot U_{rel}/D_0$). Die Ursache ist, dass sich hier noch keine Lamelle gebildet hat und daher das Modell nicht gültig ist. Mittels Least-Square Verfahren kann die in Abb. 5.2 dargestellte Ausgleichsgerade ermittelt werden, wobei nur Datenpunkte für $t^* \geq 2$ genutzt werden. Geradensteigung bzw. Schnittpunkt mit der Ordinatenachse ergibt die Parameter Θ_1 und τ . Die maximale Abweichung von der Ausgleichsgeraden beträgt 2.5 %. Die ursprünglichen Parameter von Roisman et al. ^[108] erzielen eine moderate Übereinstimmung.

Abb. 5.2 zeigt, dass das erweiterte Modell gute Ergebnisse liefert. Die Ergebnisse der Simulation liegen nahezu perfekt auf einer Geraden. Folglich ist die in Gl. 5.2 getroffene Annahme über die Charakteristik der Lamellendickenevolution gültig.

Lamellengeometrie

Die Approximation der Lamellengeometrie bei Kollisionen mit niedrigen Reynoldszahlen muss validiert werden. Wie in den Kapiteln 7.3 und 7.4 beschrieben wird, ist die Dissipationsrate bei binären Kollisionen direkt nach dem initialen Kontakt der Tropfen maximal. Die direkte Berücksichtigung der Viskosität im Modell von Roisman et al. ^[108] erfasst die Dissipation aufgrund von Reibung in der Lamelle. Die Dissipation aufgrund der Prallströmung zu Kollisionsbeginn wird indirekt erfasst, da diese die Geometrie des Stoßkomplexes beeinflusst. Folglich wird der Viskositätseinfluss im mechanistischen Modell mit einer guten Approximation der Lamellengeometrie sowie geeigneten Anfangsbedingungen für den Radius erfasst. Abb. 5.3 zeigt Simulationsergebnisse der Lamellengeometrie für Reynoldszahlen 100, 200 und 300 bei einer Weberzahl von 200.

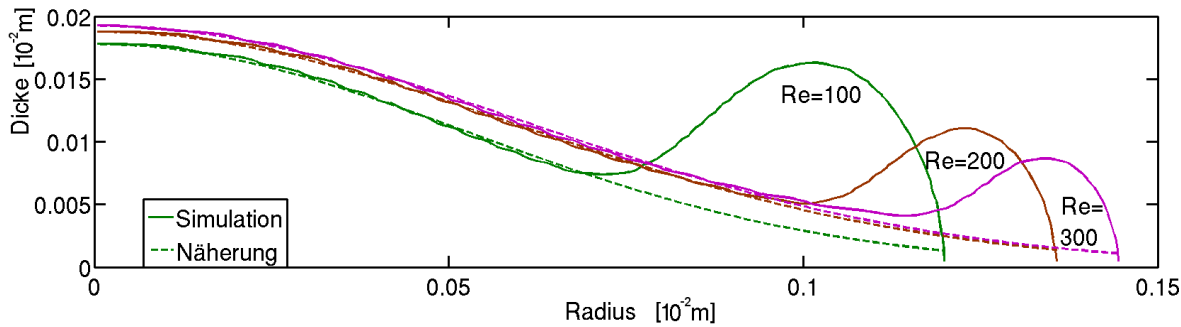


Abb. 5.3.: Lamellengeometrie und Approximation.

Für die Bestimmung des Parameters Θ_2 wird Gleichung 5.2 mittels Least-Square Approximation an die Simulationsergebnisse angepasst. Um eine Beeinflussung des Parameters Θ_2 durch den Randbereich auszuschließen, werden alle Werte, die auf das lokale Minimum vor dem Rand folgen, nicht berücksichtigt. Abbildung 5.3 zeigt die Näherung der Lamellengeometrie an die Simulationsergebnisse. Offensichtlich kann mit Gleichung 5.2 eine gute Übereinstimmung erreicht werden. Die Übereinstimmung bleibt bei der weiteren zeitlichen Entwicklung bestehen.

Anfangsbedingungen

Die Vorgehensweise bei der Bestimmung der Anfangsbedingungen R und \dot{R} in Gleichung 5.5 ist wie folgt: Zunächst werden die Radien zu zwei Zeitpunkten, $t^* = 1$ und $t^* = 2$, aus den Simulationen extrahiert. Der anfängliche Radius bei $t^* = 1$ kann direkt im Modell verwendet werden. Anschließend wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Radius angepasst, sodass der Radius im Modell mit dem Wert der Simulation bei $t^* = 2$ übereinstimmt.

Validierung der Modellierung

Die Parameter können nun in das Modell eingesetzt werden. Die Lösung der Differenzialgleichung erfolgt numerisch. Das Ergebnis ist die Entwicklung des Durchmessers als Funktion der Zeit. Abbildung 5.4 zeigt, dass das Modell eine sehr gute Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen liefert. Die Abweichung bezüglich des maximalen Durchmessers beträgt 0.2 %. Eine Übersicht über die ermittelten Parameter aller simulierten Kollisionen ist in Tabelle 5.2 dargestellt.

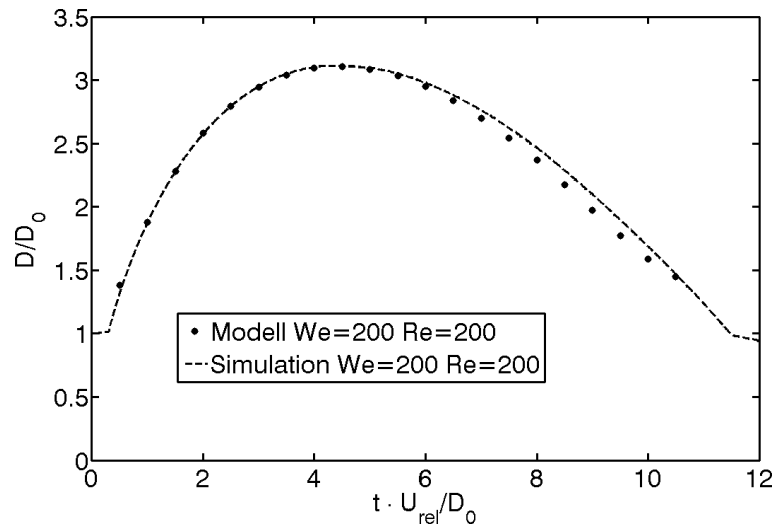


Abb. 5.4.: Validierung des mechanistischen Kollisionsmodells.

| Weberzahl \ Reynoldszahl | 100 | 200 | 300 |
|--------------------------|---|--|--|
| | | | |
| 100 | $\Theta_1 = 0.164$ $\Theta_2 = 0.222$ $\tau = -0.173$ | $\Theta_1 = 0.321$ $\Theta_2 = 0.370$ $\tau = 0.158$ | $\Theta_1 = 0.393$ $\Theta_2 = 0.436$ $\tau = 0.281$ |
| 200 | $\Theta_1 = 0.209$ $\Theta_2 = 0.355$ $\tau = -0.067$ | $\Theta_1 = 0.266$ $\Theta_2 = 0.334$ $\tau = 0.040$ | $\Theta_1 = 0.300$ $\Theta_2 = 0.357$ $\tau = 0.098$ |
| 300 | $\Theta_1 = 0.320$ $\Theta_2 = 0.017$ $\tau = 0.388$ | $\Theta_1 = 0.251$ $\Theta_2 = 0.314$ $\tau = 0.008$ | $\Theta_1 = 0.284$ $\Theta_2 = 0.359$ $\tau = 0.105$ |

Tabelle 5.2.: Die ermittelten Parameter für das erweiterte Kollisionsmodell.

5.3 Ergebnisse

Hybride Modellierung

Um ein prädiktives mechanistisches Modell zu entwickeln, werden nur die ersten Momente der Kollision simuliert, um die Anfangsbedingungen und den Geometrieparameter Θ_2 zu erhalten. Die Simulation wird bei $t \cdot U_{\text{rel}}/D_0 = 2$ gestoppt. Problematisch sind bei dieser Vorgehensweise die Parameter zur Beschreibung der Dickenevolution, da die Simulation der kompletten Kollision nötig wäre, um die Parameter für eine Kollision anzupassen. Tabelle 5.2 zeigt die Parameter der durchgeführten Simulationen. Eine Gesetzmäßigkeit zur Bestimmung von Θ_1 und τ ist nicht zu erkennen.

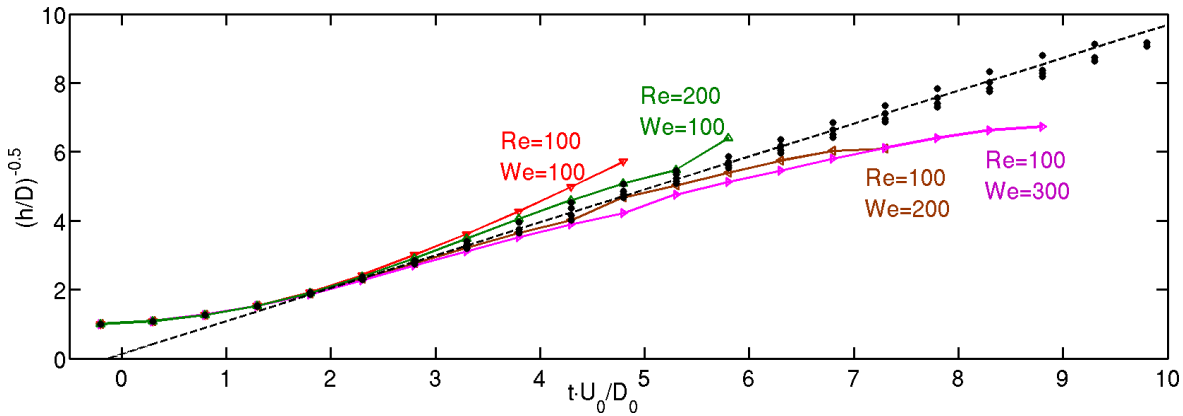


Abb. 5.5.: Lamellendicke als Funktion der Zeit. Alle Fälle, deren Dicke in dieser Darstellung einen linearen Verlauf für $t^* > 2$ zeigt, können mit dem Modell erfasst werden. Die gestrichelte Linie zeigt die Ausgleichsgerade.

In Abbildung 5.5 ist die Dickenevolution aller Simulationen dargestellt. Die Abbildung erlaubt die Bestimmung des Gültigkeitsbereichs des Modells. Für alle Fälle, die nach Gleichung 5.8 eine Gerade darstellen, ist das Modell gültig. Die Kollisionen mit der Reynoldszahl 100 sowie der Fall $Re=200$, $We=100$ fallen aus dem Gültigkeitsbereich und wurden daher auch nicht in die Berechnung der Ausgleichsgeraden mit einbezogen. Mit den verbleibenden Daten wird nun eine Gerade mittels Least-Square-Fitting ermittelt. Diese Ausgleichsgerade ist in Abbildung 5.6 gestrichelt dargestellt. Für die Parameter η_1 ergibt sich der Wert 0.299 und für τ der Wert 0.105. Diese Parameter werden nun für alle Kollisionen in dem hybriden Kollisionsmodell verwendet.

Der Geometrieparameter η_2 wird zum Zeitpunkt $t^* = 2$ bestimmt. Die Vorgehensweise zur Bestimmung ist ähnlich wie für den Validierungsfall beschrieben; der einzige Unterschied besteht darin, dass für $\frac{\Theta_1}{(t+\tau)^2}$ in Gleichung 5.2 direkt die bekannte Lamellendicke zum Zeitpunkt $t^* = 2$ eingesetzt wird.

Validierung des hybriden Modells

Ergebnisse für $We = 300$ unter Variation der Reynoldszahl sind in Abb. 5.6 dargestellt. Die größte Abweichung beträgt 2.7 % für den Maximaldurchmesser und tritt im Fall von $Re=100$ auf. Die größte Abweichung wird beim größten Viskositätseinfluss beobachtet, da die Lamelle bei hoher Viskosität vergleichsweise kurz existiert und daher nicht optimal in den Gültigkeitsbereich des Modells fällt. Außerdem ist der Rand, bezogen auf den Gesamtdurchmesser, größer. Daraus folgt eine vergrößerte Übergangszone, die im vorliegenden Modell nicht erfasst wird. Abbildung 5.6 zeigt, dass der Zeitpunkt, bei dem der maximale Durchmesser entsteht, gut vorhergesagt wird. Die Rückzugsgeschwindigkeit ist beim Modell für $Re=100$ langsamer, für

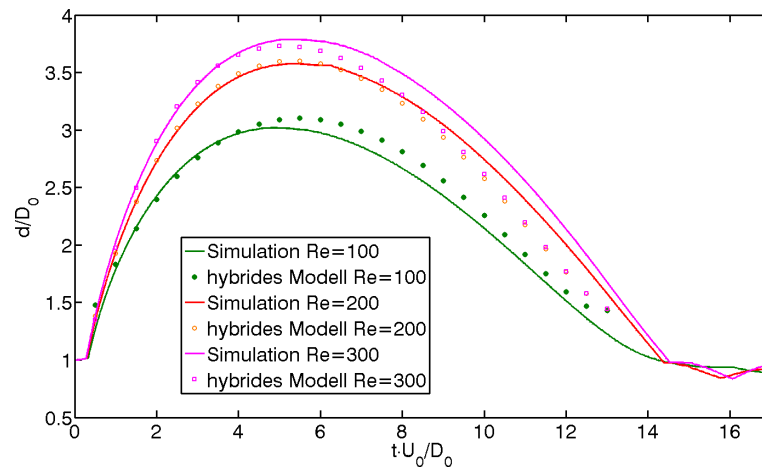


Abb. 5.6.: Simulation und Ergebnisse des Modells für eine Weberzahl von 300.

Re=200 und Re=300 sagt das Modell einen schnelleren Rückzug voraus. Das Ende der Kontraktionsphase wird in allen drei Fällen fast gleichzeitig erreicht.

Vergleich: Experiment, Simulationen und mechanistisches Modell

Mittels hybrider Modellierung soll die Entwicklung des Durchmessers einer Kollision vorhergesagt werden, die am Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR), Universität Stuttgart, experimentell untersucht wurde. Ziel ist der Vergleich von Simulation, Experiment und mechanistischem Modell.

Experiment

Die zentrale Kollision von zwei gleichgroßen Isopropanol-Tropfen wird experimentell untersucht. Der Durchmesser beträgt $233 \mu\text{m}$, die Relativgeschwindigkeit beträgt 5.7 m/s . Die Materialwerte von Isopropanol sind eine Dichte von 784.5 kg/m^3 , eine Viskosität von 2.39 mPa s und eine Oberflächenspannung von $2.14 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$. Damit ergibt sich eine Weberzahl von 273 und eine Reynoldszahl von 432.

Simulation

Die Simulation der Kollision erfolgt mit dem Volume-of-Fluid Code FS3D mit einem Rechengebiet mit $7.5 \times 7.5 \times 3.25 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ und einer Auflösung von $256^2 \times 128$ Zellen mit drei Symmetrieebenen. In der Prallebene ist zusätzlich die Lamellenstabilisierung aktiv. Die resultierende Auflösung beträgt 80 Zellen/ D_0 . Um die Gitterabhängigkeit zu überprüfen, wurde eine Gitterstudie mit 60 Zellen/ D_0 und 40 Zellen/ D_0 durchgeführt, deren Ergebnis in Abbildung 5.7 dargestellt ist. Das Diagramm links im Bild

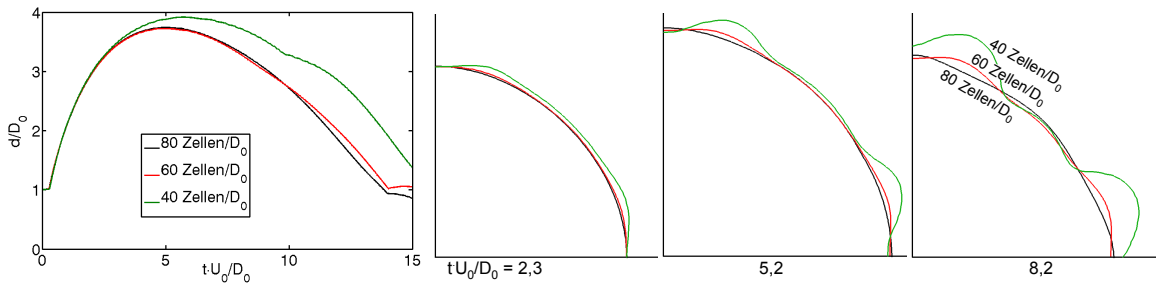


Abb. 5.7.: Gitterstudie mit 40, 60 und 80 Zellen/ D_0 . Links ist die Entwicklung des Durchmessers dargestellt, die rechten Bilder zeigen die Geometrie der Grenzfläche in der Prallebene zu verschiedenen Zeitpunkten.

zeigt, dass die Entwicklung des Durchmessers im Fall von 60 und 80 Zellen/ D_0 sehr ähnlich ist. Der Fall mit 40 Zellen/ D_0 führt zu einem vergrößerten Maximaldurchmesser, außerdem ist ein Knick bei $t^* \approx 10$ zu erkennen. Die Abbildungen rechts zeigen die Geometrie der Grenzfläche. Bei 60 Zellen/ D_0 ist nur eine geringe Abweichung vom Referenzfall bzw. von der Kreisform zu erkennen. Bei 40 Zellen/ D_0 sind zwei deutliche Ausbuchtungen zu erkennen. Aufgrund des groben Gitters setzt hier eine Instabilität des Randes ein. Anfangs sind insgesamt 8 Ausbuchtungen (2 pro Vierteltropfen) zu beobachten. Im weiteren Verlauf übersteigt die Größe der Ausbuchtungen einen kritischen Wert. In der Folge verschmelzen je zwei benachbarte Ausbuchtungen. Dieser Effekt führt zu dem Knick in der Entwicklung des Durchmessers. Eine Simulation eines kompletten Tropfens, der gegen eine Symmetriewand prallt, zeigt dieselbe Kollisionsdynamik. Folglich kann dieser Effekt nicht auf die seitlichen Symmetriewände zurückgeführt werden.

Diese Untersuchungen zeigen, dass der Fall mit 80 Zellen/ D_0 ausreichend aufgelöst ist und bei einer weiteren Gitterverfeinerung keine Änderung des Durchmessers zu erwarten ist. Der Maximaldurchmesser wird mit guter Genauigkeit vorhergesagt. Die Kontraktion des Stoßkomplexes ist in der Simulation leicht verzögert, insgesamt beträgt die Verzögerung am Simulationsende 5%. Die für die mechanistische Modellierung nötige Entwicklung des Durchmessers sowie die Geometrie der Grenzfläche ist zu Beginn der Kollision für alle gezeigten Simulationen gleich und kann daher auch für die Bestimmung der Parameter des hybriden Modells verwendet werden. Die CPU-Zeiten für die Simulation der Kollision bei 40 und 80 Zellen/ D_0 stehen im Verhältnis von 1:32. Der Vergleich einer Simulation der Anfangsphase mit grober Auflösung und einer hoch aufgelösten Simulation der gesamten Kollisionsdynamik bis zum Ende der Kontraktionsphase liefert ein Verhältnis der CPU-Zeiten von 1:300. Bei der Simulation der Anfangsphase ist noch keine Lamellenstruktur vorhanden, daher stellt dieser Fall keine außergewöhnlichen Anforderungen an den Mehrphasen-Strömungslöser. Bei der Simulation der gesamten Kollision wird das Auftreten einer dünnen Lamelle beobachtet, welche mit speziellen Techniken vor dem numerisch be-

dingten Zerfall bewahrt werden muss. Die hier genutzte Lamellenstabilisierung wird in Kapitel 4 beschrieben.

Hybride Modellierung

Die Geometrie der Grenzfläche wird nach dem oben beschriebenen Verfahren bestimmt, der Geometrieparameter Θ_2 ergibt sich zu 0.371. Aus der Simulation der Anfangsphase ergibt sich ein dimensionsloser Durchmesser d/D_0 von 2.1 bei $t^*=1$ und 2.3 bei $t^*=2$. Der Durchmesser von 2.3 bei $t^*=2$ wird erreicht, wenn eine dimensionslose Ausbreitungsgeschwindigkeit von $\dot{R}=2.14$ eingestellt wird. Das Resultat ist in Abbildung 5.8 dargestellt. Die Differenz bezüglich des maximalen Durchmessers beträgt 1.7 % im Vergleich mit der Simulation und 1.5 % im Vergleich mit den experimentellen Daten.

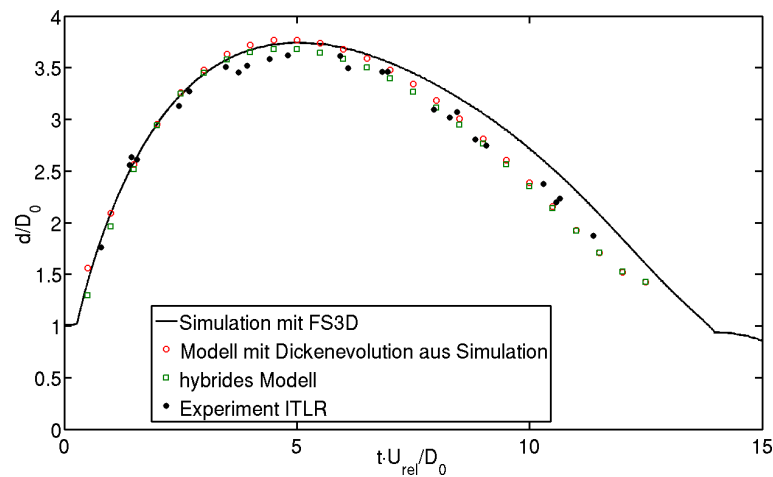


Abb. 5.8.: Simulationsdaten, Ergebnisse des hybriden Kollisionsmodells und experimentelle Daten des ITLR im Vergleich. Zusätzlich sind Ergebnisse des Modells dargestellt, bei denen die volle Evolution der Lamellendicke aus der Simulation für die Bestimmung der Parameter Θ_1 und τ genutzt wurde.

Limitierungen des mechanistischen Modells

Das Modell besitzt zwei Limitierungen. Der Minimalwert für Weber- und Reynoldszahl ist begrenzt durch die Forderung, dass die Kollisionsdynamik eine Phase aufweisen muss, in der eine Lamelle zu beobachten ist. Bei einer zu kurzen Lamellenphase sind die im Modell getroffenen Vereinfachungen nicht gültig; beispielsweise zeigt Abb. 5.5, dass in Fällen von geringen Weber- und Reynoldszahlen die Evolution der Lamellendicke nicht mit den genutzten Gleichungen beschrieben werden kann. Eine Kollision ohne Lamelle kann problemlos mit DNS untersucht werden, ohne dass eine hohe Auflösung nötig ist.

Der Maximalwert für Weber- und Reynoldszahl ist begrenzt, da sich die Dickenevolution mit steigender Kollisionsenergie ändert. Die Parameter Θ_1 und τ wurden anhand von Kollisionen mit Weberzahlen im Bereich von 100 - 300 bestimmt und für diesen Bereich validiert. Abbildung 5.9 zeigt, dass bei einer höheren Weberzahl von 357 und einer Reynoldszahl von 178 bereits Abweichungen zu beobachten sind. Für Weberzahlen oberhalb 300 sollte daher das Originalmodell von Roisman et al.^[108] genutzt werden.

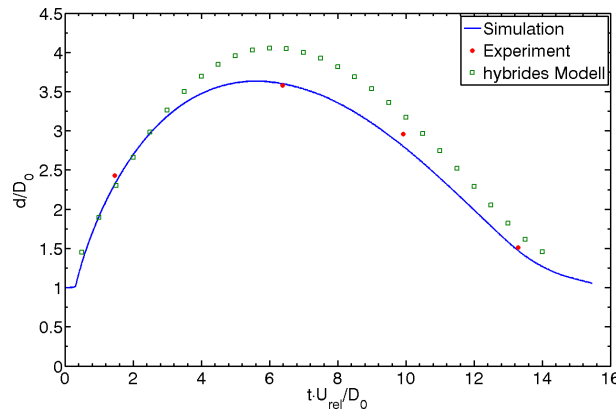


Abb. 5.9.: Simulations- und Modellergebnisse sowie experimentelle Daten^[127] für eine Kollision mit $We=357$ und $Re=178$.

Fazit

Das mechanistische Kollisionsmodell von Roisman et al.^[108], welches für große Reynolds- und Weberzahlen gültig ist, wurde auf den Bereich moderater Weber- und Reynoldszahlen erweitert. Dazu werden unterschiedliche Parameter für die Geometriebeschreibung der Lamelle eingeführt. Die Parameter der Gleichung der Lamellendicke werden zum einen an die Lamellendicke im Stoßkomplexzentrum als Funktion der Zeit angepasst und zum anderen an die Lamellendicke als Funktion des Radius. Um das Modell zu validieren, werden Simulationen von zentralen Kollisionen gleichgroßer Tropfen durchgeführt und die Parameter der Lamellendicke an die Simulationsergebnisse angepasst. Das Kollisionsmodell erlaubt eine Vorhersage des Stoßkomplexdurchmessers als Funktion der Zeit. Der Vergleich mit den Simulationsdaten zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der Durchmesserrevolution. Folglich sind die Annahmen und Vereinfachungen des Kollisionsmodells im Bereich moderater Weber- und Reynoldszahlen gültig und erlauben mit geeigneten Parametern eine Vorhersage der Kollisionsdynamik während der Expansions- und Kontraktionsphase.

Eine Simulationsstudie zeigt, dass konstante Parameter für die Lamellendicke als Funktion der Zeit in einem Weberzahlbereich von 100 - 300 und einem Reynoldszahlbereich von 200 - 300 ermittelt werden können. Der Parameter für die Lamellendicke

als Funktion des Radius kann aus Simulationsdaten der Anfangsphase der Kollision ermittelt werden. Bei der Simulation binärer Kollisionen ist insbesondere die Berücksichtigung einer dünnen Pralllamelle anspruchsvoll. Die Pralllamelle tritt noch nicht in der Anfangsphase auf, folglich kann die Simulation mit grober Auflösung ohne Berücksichtigung der Pralllamelle durchgeführt werden. Insgesamt kann die CPU-Zeit der Simulation auf bis zu 1/300 gesenkt werden.

Die Ergebnisse des Modells für eine Tropfenkollision bei einer Weberzahl von 273 und einer Reynoldszahl von 432 werden mit experimentellen Ergebnissen des Instituts für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR), Universität Stuttgart, verglichen und zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der Durchmesserrevolution mit einer Abweichung von 1.5 % bezüglich des maximalen Durchmessers. Das mechanistische Kollisionsmodell ist somit geeignet, um die Dynamik zentraler Kollisionen von gleichgroßen Tropfen bei moderaten Reynolds- und Weberzahlen vorherzusagen.

6 Kollision von Tropfen mit ungleicher Viskosität

Die Sprühtrocknung ist das häufigste Verfahren zur Herstellung von Pulvern. Abhängig von der Tropfengrößenverteilung kann die Verweilzeit der Tropfen im Sprühturm variieren. Aufgrund der Trocknung verändert sich der Polymergehalt und damit die Viskosität. Tropfen mit unterschiedlichen Trocknungshistorien können beispielsweise in Rezirkulationszonen kollidieren und beeinflussen die Eigenschaften des partikulären Produkts. Eine gezielte Herbeiführung solcher Kollisionen ist ebenfalls denkbar um z. B. verkapselte Partikel zu erhalten.

Eine große Anzahl experimenteller Studien sind der Kollision von Tropfen mit unterschiedlichen Flüssigkeiten gewidmet, d.h. unterschiedlicher Dichte, Viskosität und Oberflächenspannung. Planchette et al. ^[93,94] untersuchen das Kollisionsergebnis von nicht mischbaren Tropfen mit unterschiedlicher Oberflächenspannung und den Einfluss der Materialparameter. Die Untersuchung von Gao et al. ^[38] ist in erster Linie Kollisionen von Tropfen mit einer großen Oberflächenspannungsdifferenz gewidmet. Chen ^[18] vergleicht binäre Kollisionen von Diesel-Tropfen mit Kollisionen zwischen Diesel- und Ethanol-Tropfen. Weitere Untersuchungen zu Kollisionen von Diesel- und Ethanol-Tropfen werden von Chen und Chen ^[19] durchgeführt. Der größte Einfluss auf die Kollisionsdynamik wird dabei der Differenz der Oberflächenspannung zugeschrieben. Roisman et al. ^[108] untersuchen Kollisionen von Tropfen nicht mischbarer Flüssigkeiten experimentell und entwickeln ein theoretisches Modell, welches die wesentlichen geometrischen Parameter vorhersagt. Dooley et al. (1997) ^[29] sowie Cresswell und Morton (1995) ^[23] untersuchen die innere Durchmischung eines Tropfen in Kontakt mit einer flüssigen Schicht und identifizieren die Bildung eines Wirbelrings. Der initiale Kontakt ruhender Tropfen aus unterschiedlichen Flüssigkeiten wird in Thoroddsen et al. (2007) ^[120] untersucht. In beiden Fällen wird die Strömung und die daraus resultierende Verteilung der unterschiedlichen Flüssigkeiten auf die Differenz der Oberflächenspannung zurückgeführt.

Die vorliegende Untersuchung ist Kollisionen von Lösungstropfen mit unterschiedlichem Polymergehalt mittels numerischer Simulation gewidmet. Die Tropfen haben eine ungleiche newtonsche Viskosität, aber gleiche Oberflächenspannung und Dichte. Im Gegensatz zu früheren Arbeiten sind die Flüssigkeiten mischbar und es herrscht keine Oberflächenspannung an der Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten der Tropfen. In der vorliegenden Arbeit wird anhand von zwei Prototypfällen die

Strömung im Inneren der Tropfen untersucht. Die beiden Fälle sind einerseits die Kollision zwischen einem kleinen hoch- und einem größeren niedrigviskosen Tropfen, sowie andererseits die Kollision gleichgroßer Tropfen. Das Viskositätsverhältnis der Flüssigkeiten beträgt 1:23 aufgrund eines unterschiedlichen Polymergehalts. Die in diesem Kapitel gezeigten Experimente wurden an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Mechanische Verfahrenstechnik bei Prof. Sommerfeld durchgeführt. Sie zeigen, dass kollidierende Tropfen mit unterschiedlicher Viskosität nicht sofort verschmelzen, wenn sie in Kontakt kommen, sondern dass die Koaleszenz verzögert eintritt.

In der numerischen Simulation ist der Bereich des Flüssigkeitsvolumens durch einen gemeinsamen Phasenindikator definiert. Ein zusätzlicher skalarer Massenanteil wird verwendet, der das gelöste Polymer repräsentiert und die erhöhte Viskosität ist an diesen gekoppelt. Eine wesentliche Schwierigkeit ergibt sich bei der Simulation der verzögerten Koaleszenz. Der dünne Luftfilm, der die Tropfen in den Experimenten trennt, kann numerisch nicht aufgelöst werden. Daraus resultiert das künstliche Verschmelzen der Tropfen bei Annäherung. In den Simulationen soll das Verschmelzen numerisch unterdrückt werden, wobei die Dauer der Verzögerung von den experimentellen Resultaten erhalten wird. Eine Analyse wird durchgeführt, um den Einfluss des angewendeten Verfahrens zu bewerten. Dieser Ansatz ist zwar nicht vollständig prädiktiv, ermöglicht aber dennoch eine Untersuchung der inneren Strömungsfelder sowie der Verteilung der unterschiedlichen Flüssigkeiten im Inneren der Tropfen.

6.1 Modellierung

Die Lage der beiden Tropfen wird numerisch durch einen gemeinsamen Phasenindikator dargestellt. Diejenige Flüssigkeit, welche die höhere Polymerkonzentration enthält, wird durch einen zusätzlichen skalaren Massenanteil y dargestellt. Die Transportgleichung für die Lösemitteldichte ρ_i lautet

$$\partial_t \rho_i + \nabla \cdot (\rho_i (\mathbf{v} + \mathbf{u}_i)) = 0 \quad (6.1)$$

mit der baryzentrischen Geschwindigkeit \mathbf{v} der gesamten Mischung und der Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{u}_i , d.h. die Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Lösungsmittel und Gemisch. Die Einführung des Massenanteils $y_i = \rho_i / \rho$ und des Diffusionsflusses $\mathbf{j}_i = \rho_i \mathbf{u}_i$ in Gleichung 6.1 in Verbindung mit der Kontinuitätsgleichung ergibt

$$\rho (\partial_t y_i + \mathbf{v} \cdot \nabla y_i) + \nabla \cdot \mathbf{j}_i = 0, \quad (6.2)$$

wobei die Schwankungen der Gesamtdichte als gering angenommen werden. Der Einfluss der Vermischung aufgrund von Diffusion kann wie folgt abgeschätzt werden:

Die Diffusivität einer gelösten Komponente bzw. einer anderen Flüssigkeit in einem flüssigen Lösungsmittel ist in der Größenordnung $d = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ oder kleiner^[26]. Die Mischungslänge durch Diffusion kann geschätzt werden als

$$L_{\text{diff}} = \sqrt{\tau d}. \quad (6.3)$$

Die Zeitskala τ der Kollisionsprozesse, definiert als $(D_1 + D_2)/(2U_{\text{rel}})$, beträgt $2 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ bei beiden untersuchten Kollisionen. Nach Gleichung 6.3 beträgt die diffusive Längenskala $5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$; dies entspricht einer relativen Mischungslänge von $L_{\text{diff}}/D \approx 1/1000$. Daher kann die Diffusion von Masse in den vorliegenden Simulationen problemlos vernachlässigt werden, daher wird \mathbf{j}_i in Gl 6.2 auf null gesetzt.

Verzögerung der Koaleszenz

Bei der Kollision zwischen einem hoch- und einem niedrigviskosen Tropfen wird in Experimenten eine zeitlich verzögerte Koaleszenz beobachtet. Die Tropfen nähern sich an und verformen sich, ohne dass es zum sofortigen Verschmelzen der Oberflächen kommt. In den experimentellen Bildern kann die verzögerte Koaleszenz leicht identifiziert werden, da die Anwesenheit von zwei getrennten Oberflächen zu einem Knick an der Grenze des Kontaktbereichs führt. Der Effekt einer verzögerten Koaleszenz kann auch bei der Kollision von Tropfen mit unterschiedlicher Oberflächenspannung und Viskosität beobachtet werden. Chen und Chen^[19] zeigen diesen Effekt, beschreiben ihn jedoch nicht. Der Grund für die Verzögerung der Koaleszenz ist, dass sich Luft zwischen den sich nähernden Tropfen befindet und eine gewisse Zeit benötigt, um den Spalt zu verlassen. Ein ähnliches Verhalten kann bei dem Kollisionsergebnis Bouncing (Abprallen) beobachtet werden, mit dem Unterschied, dass die Tropfen während der gesamten Kontaktzeit nicht verschmelzen. Im Falle von Bouncing konnte die Größenordnung der minimalen Breite des Spaltes zu $0.01 \mu\text{m}$ bestimmt werden^[64]. Die Auflösung dieser Längenskala in der Simulation einer Tropfenkollision würde zu einem enormen Rechenaufwand aufgrund einer großen Anzahl von Gitterzellen in Verbindung mit einem extrem kleinen Zeitschritt führen und ist derzeit in einer Direkten Numerischen Simulation auch mit High Performance Computing-Techniken nicht möglich.

In der vorliegenden Arbeit wird der Ansatz verfolgt, die Koaleszenz durch eine Modifikation der Berechnung der Oberflächenspannung zu unterdrücken und die Verzögerungsdauer aus den experimentellen Ergebnissen zu nutzen. Anschließend wechselt der Algorithmus zur normalen Berechnung der Oberflächenspannung, was zur sofortigen Koaleszenz der Tropfen führt.

Zu Beginn der Kollision werden die Kräfte der Oberflächenspannung für beide Tropfen getrennt berechnet. Die getrennten Tropfen können während der Kollision durch den skalaren Massenanteil y unterschieden werden, siehe Abb. 6.1. Die

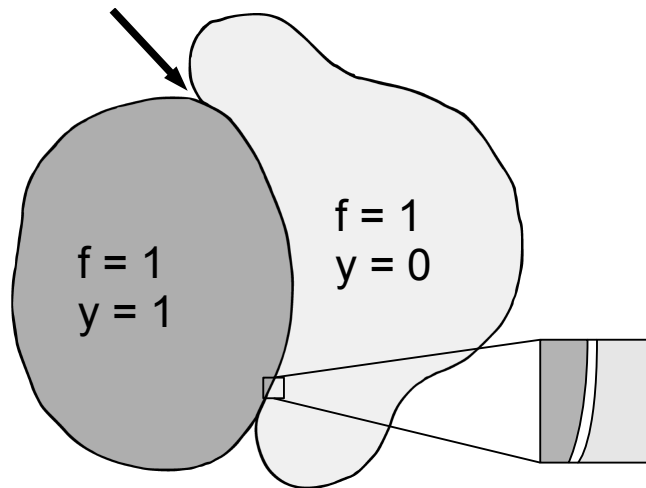


Abb. 6.1.: Skizze von zwei kollidierenden Tropfen mit verzögerter Koaleszenz. Die Lage des Tropfenvolumens kann während der Kollision mithilfe des Phasenindikators f und des normierten Massenanteils an gelöstem Polymer y identifiziert werden. Der Pfeil in der Abbildung zeigt auf den Knick, der in den Experimenten beobachtet wird. Die Luft zwischen den Tropfen ist in Experimenten nicht sichtbar.

Lage der Flüssigkeit wird durch den Phasenindikator f repräsentiert. Die Oberflächenspannung wird einmal für den Tropfen ohne skalaren Massenanteil berechnet ($f - y$) und einmal für die Tropfen mit skalarem Massenanteil (y). Die Gesamtkraft der Oberflächenspannung wird als Summe der beiden Kraftfelder erhalten. Zu einer vorher festgelegten Zeit wechselt die Berechnung der Oberflächenspannung in den Standardmodus, in dem nur das gemeinsame f -Feld für die Berechnung der Kräfte verwendet wird. Dies führt zu einem sofortigen Verschmelzen der Tropfen. Die Koaleszenzverzögerung endet zu dem Zeitpunkt, bei dem der Knick in den experimentellen Bildern verschwindet. Mit dieser Technik kann die Dynamik einer Tropfenkollision mit verzögerter Koaleszenz erfasst werden und die Untersuchung der Strömung innerhalb des Kollisionskomplexes wird möglich.

Bei der Simulation der verzögerten Koaleszenz verhält sich die Strömung so, als ob sich zwischen den beiden Tropfen zuerst zwei flüssig-gasförmig-Grenzflächen befinden, anschließend existiert nur noch eine flüssig-flüssig-Grenzfläche. Dies führt zu einem unphysikalischen Verlust von Oberflächenenergie (σA), dessen Einfluss auf die Kollisionsdynamik im Folgenden untersucht wird. Eine ähnliche Koaleszenzunterdrückung wird von Coyajee und Boersma (2009)^[22] für eine gekoppelte Level-Set / Volume-of-Fluid Methode beschrieben, um aufsteigende Gasblasen ohne Koaleszenz sowie das Abprallen eines Tropfens von einer planaren Flüssigkeitsgrenzfläche zu simulieren.

6.2 Validierung

Das Verfahren, die Koaleszenz bis zu einem vorgegebenen Zeitpunkt zu verzögern, wird in der Literatur beschrieben. Nikolopoulos et al.^[73] zeigen Ergebnisse für eine VOF-Simulation mit einer verzögerten Koaleszenz, ohne eine Beschreibung der Technik, welche die Tropfen voneinander getrennt hält. Energiebilanzen zeigen den stufenartigen Energieverlust, der durch das Verschwinden der Oberfläche aufgrund der Koaleszenz verursacht wird, eine weitere Analyse erfolgt nicht. Pan et al.^[86] benutzen ein Interface-Tracking-Code (das Gitter folgt dem Interface) und verbinden die Tropfen zu einem vordefinierten Zeitpunkt. Sie erwähnen, dass “eine relativ große Menge an Energie verloren geht”, führen jedoch keine weitere Analyse zu diesem Energieverlust durch.

Der vorliegende Abschnitt befasst sich mit der Frage, ob ein erheblicher Einfluss auf die Tropfendynamik entsteht, wenn die im Spalt gespeicherte Grenzflächenenergie frei wird. Dazu wird eine Simulationsstudie durchgeführt. In einer Simulation wird der physikalische Prozess der verzögerten Koaleszenz unter Berücksichtigung der Strömungsdynamik im Spalt simuliert und mit einer anderen Simulation zu vergleichen, bei der die Koaleszenz temporär unterdrückt wird. Der Testfall ist eine zentrale Kollision zwei gleichgroßer Tropfen; simuliert wird ein Tropfen, der mit einer Symmetrieebene kollidiert. Die Reynoldszahl ist 80, die Weberzahl ist 59 und der Tropfendurchmesser wird mit 80 Zellen aufgelöst.

Die Vorgehensweise und die resultierende Kollisionsdynamik sind wie folgt (siehe Abb. 6.2):

- Die Simulation beginnt und der Tropfen bewegt sich in beiden Fällen in Richtung der Symmetrieebene. Anschließend kollidiert der Tropfen mit der Symmetrieebene. Der Kontaktwinkel wurde auf 180° gesetzt, folglich verschmilzt die Oberfläche des Tropfens nicht mit der Symmetrieebene. Der Kontaktwinkel wird durch eine Modifikation der f -Werte in den sogenannten Dummy-Zellen eingestellt. Diese befinden sich auf dem Rand des Rechengebiets, um die Randbedingungen zu definieren^[10].
- Die Simulation, die den physikalischen Prozess der verzögerten Koaleszenz nachahmt, erfordert eine dünne Luftschicht, die den Spalt darstellt. Diese dünne Schicht wird künstlich erzeugt, indem alle Felder eine Zelle weit von der Symmetrieebene weg verschoben werden. So entsteht eine leere Schicht mit einer Zelle Dicke über der Symmetrieebene, die mit ruhender Luft initialisiert wird. Die Spaltweite beträgt $78\mu\text{m}$, entsprechend $0.013 D_0$. Die physikalische Dicke des Spaltes ist nicht bekannt; der Einfluss der Spaltdicke auf die Kollisionsdynamik wird weiter unten beschrieben. Zusätzlich wird ein Kontakt

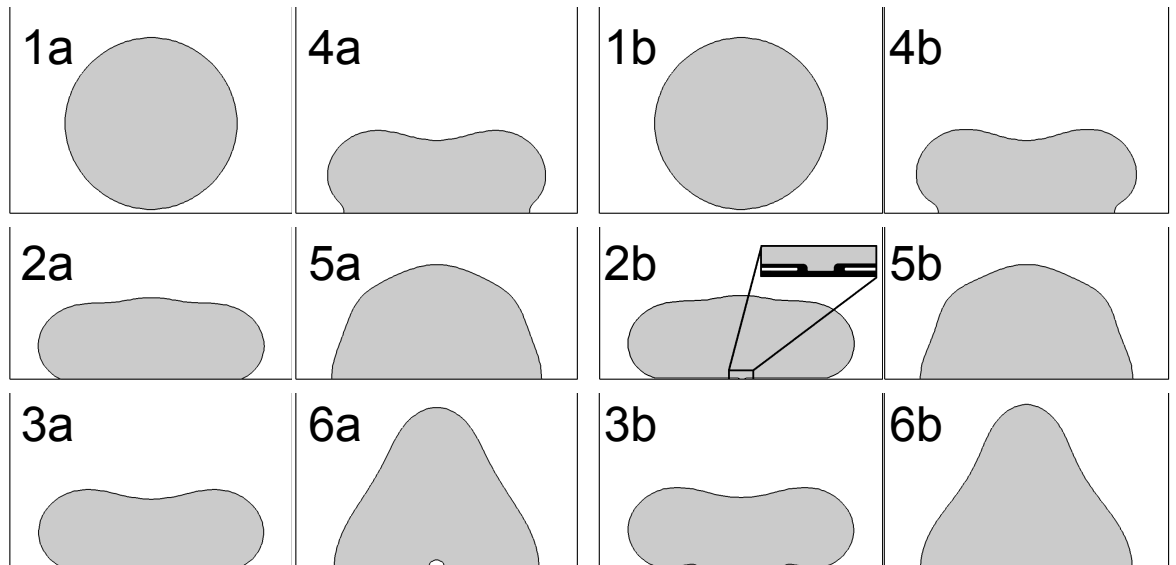


Abb. 6.2.: Grenzflächengeometrie von zwei Tropfen bei Kollision mit einer Symmetrieebene. Auf der linken Seite (a) wird die temporäre Unterdrückung der Koaleszenz initiiert, indem der Kontaktwinkel zwischen den Bildern 3 a und 4 a von 180° zu 90° geändert wird. Auf der rechten Seite (b) wird unter dem Tropfen ein Spalt erzeugt (Bild 2 b). Zusätzlich wird ein Kontakt in der Spaltmitte erzeugt, um den Beginn der Koaleszenz zu imitieren. Die weitere Kollisionsdynamik ist nahezu identisch, lediglich in eine Blase entsteht im Fall der Koaleszenzunterdrückung (Bild 6 a).

zwischen dem Tropfen und der Symmetrieebene erzeugt, indem eine dünne Flüssigkeitsbrücke in der Spaltmitte initialisiert wird und der Kontaktwinkel wird auf 90° gestellt. Die daraus resultierende Koaleszenz ist in Abbildung 6.2, Bild 2 b und 3 b zu erkennen; die Grenzfläche bewegt sich nach außen und verdrängt die Luft aus dem Spalt. Bei der Simulation mit der temporären Unterdrückung der Koaleszenz wird der Kontaktwinkel von 180° zu 90° geändert, sobald die Grenzflächen in beiden Simulationen dieselbe Position auf der Symmetrieebene haben.

- Die weitere Entwicklung der Kollisionsdynamik ist in beiden Fällen fast gleich, siehe Abb. 6.2. Der einzige signifikante Unterschied ist eine Blase, die sich im Fall des Tropfens mit der temporären Koaleszenzunterdrückung bildet. Die Luft befindet sich bereits seit dem Aufprall auf der Symmetrieebene in Zellen zwischen Tropfen und Symmetrierand. Die Luft ist auf viele Zellen verteilt und aufgrund des niedrigen Luftanteils erfolgt zunächst keine Rekonstruktion dieses Gasfilms. Die Oberflächenspannung führt zu der Bildung einer Blase, die schließlich in Bild 6 a sichtbar wird.

Der Verlauf der Energien während der beiden Prozesse ist in Abbildung 6.3 dargestellt. Bei der Simulation mit dem erzeugten Spalt ist die Entwicklung der Oberflächenenergie stetig. In dem anderen Fall zeigt ein Sprung von $15.5 \cdot 10^{-7} \text{ J}$ den Verlust

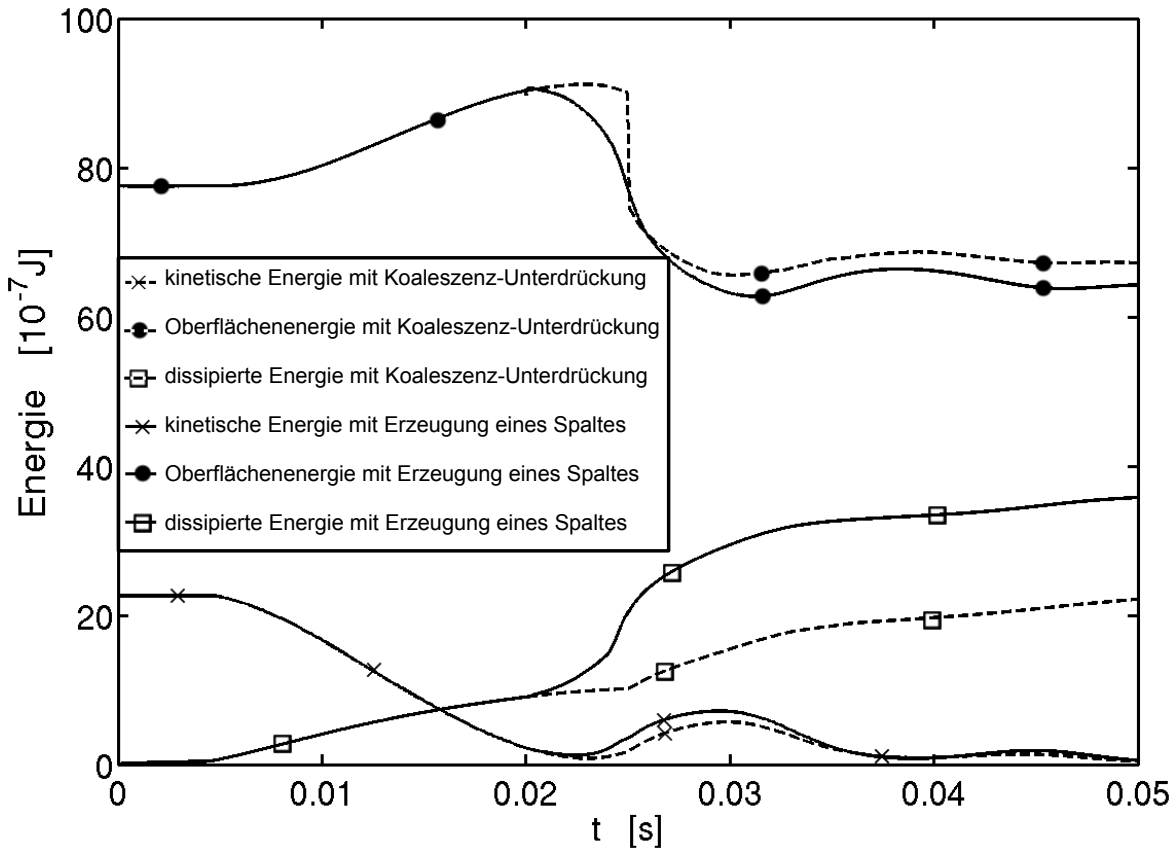


Abb. 6.3.: Energiebilanz der Kollisionen aus Abbildung 6.2. Die gestrichelten Linien repräsentieren die Energieentwicklung mit der temporären Koaleszenzunterdrückung (a in Abb. 6.2). Die durchgezogenen Linien beziehen sich auf Kollision, bei der ein Spalt erzeugt wird (b in Abb. 6.2).

der Oberflächenenergie, da bei der Koaleszenz die Oberfläche im Spalt zwischen den Tropfen verschwindet. Die weitere Entwicklung der Oberflächenenergie ist ähnlich, der Abstand der Kurven ist auf die Bildung einer kleinen Blase im Fall der Koaleszenzunterdrückung zurückzuführen. Die Entwicklung der kinetischen Energie ist nahezu identisch und zeigt, dass sogar die Oszillationsfrequenz der Tropfen, gekennzeichnet durch lokale Maxima der kinetischen Energie, identisch ist. Ein Unterschied wird in der Evolution der dissipierten Energie beobachtet. Mehr Energie wird in der Simulation, in der der Spalt erzeugt wird, dissipiert. Der Verlauf der Energien zeigt eine $13.7 \cdot 10^{-7} \text{ J}$ höhere Dissipation, verglichen mit dem Fall der Koaleszenzunterdrückung. Dies entspricht dem Sprung der Oberflächenenergie mit einer Toleranz von 5 %. Dies zeigt, dass fast die gesamte im Spalt gespeicherte Oberflächenenergie viskos dissipiert wird. Folglich kann ein signifikanter Einfluss der Koaleszenzunterdrückung auf die nachfolgende Kollisionsdynamik ausgeschlossen werden.

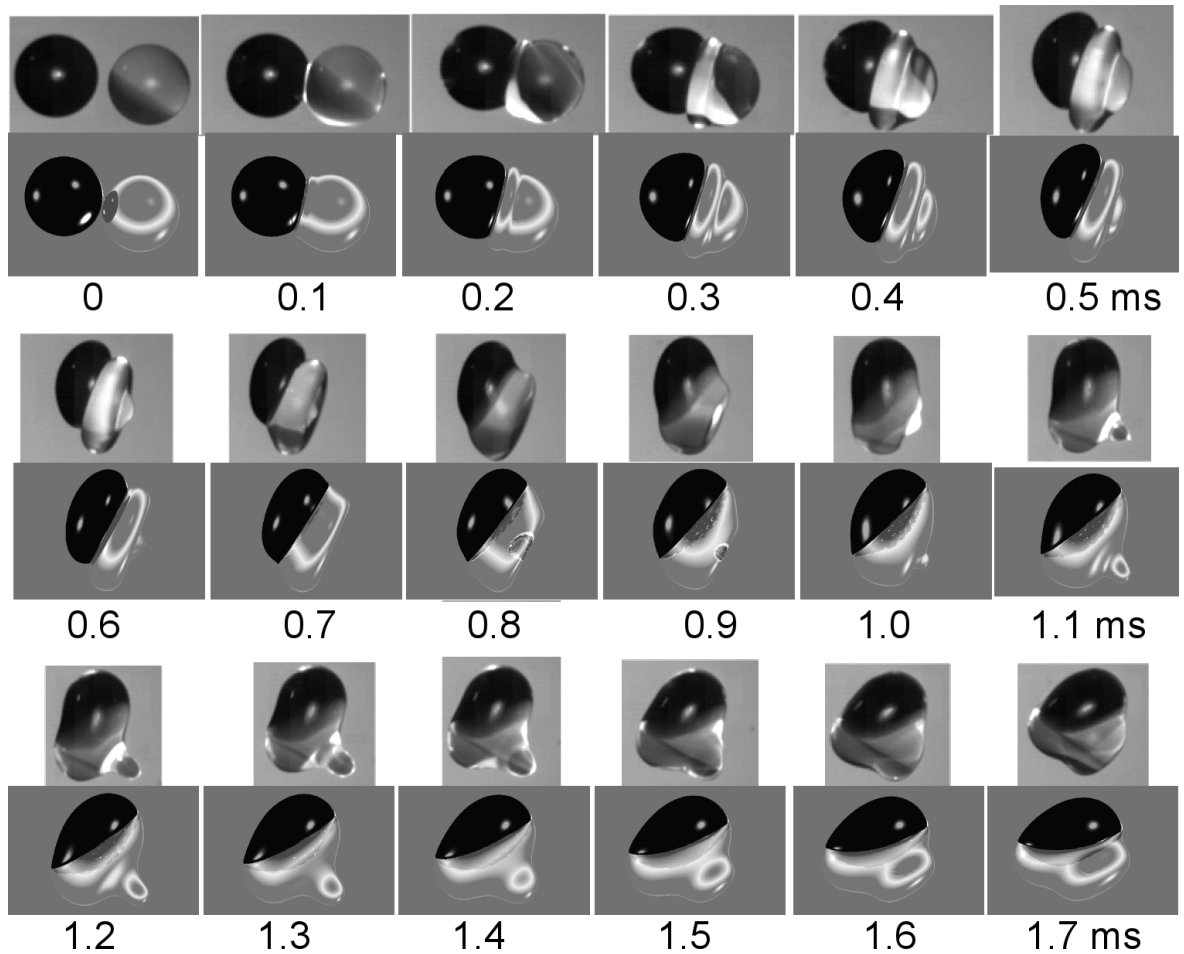


Abb. 6.4.: Kollision eines hochviskosen Tropfens (von links kommend) mit einem niedrigviskosen Tropfen, bei der eine verzögerte Koaleszenz zu beobachten ist. Die obere Reihe enthält experimentelle Bilder (von Prof. Sommerfeld, MLU Halle-Wittenberg), darunter sind numerische Ergebnisse abgebildet. Dem niedrigviskosen Tropfen wurde ein Fluoreszenzmarker beige-mischt, sodass er in den experimentellen Bildern hell erscheint.

6.3 Ergebnisse

Kollision eines hochviskosen mit einem niedrigviskosen Tropfen gleicher Größe

Ausgangspunkt für die Untersuchung der Dynamik von Tropfenkollision mit unterschiedlicher Viskosität ist der Fall einer Kollision von gleichgroßen Tropfen mit kleinem Versatz. Die Bilderserie in Abbildung 6.4 zeigt eine solche Kollision nicht-isoviskoser Tropfen mit verzögerter Koaleszenz. Die Experimente wurden an der Martin-Luther-Universität (MLU) Halle-Wittenberg, Mechanische Verfahrenstechnik bei Prof. Sommerfeld durchgeführt.

Die experimentellen Bilder sind in der oberen Reihe dargestellt, darunter die entsprechenden numerischen Ergebnisse. Das Zeitintervall zwischen zwei Bildern be-

| | Tropfen 1 | Tropfen 2 |
|---------------------|--------------------------|--------------------------|
| Flüssigkeit | 5 % PVP in Wasser | 25 % PVP in Wasser |
| Viskosität | 2.6 Pa s | 60 Pa s |
| Dichte | 1009.8 kg/m ³ | 1056.2 kg/m ³ |
| Oberflächenspannung | $6.55 \cdot 10^{-2}$ N/m | $6.0 \cdot 10^{-2}$ N/m |
| Fluoreszenzmarker | Rhodamin B | - |
| D ₀ | 720.2 μ m | 709.8 μ m |
| U _{rel} | 1.33 m/s | |
| Versatz | 0.135 | |
| Weberzahl | 26.16 | |

Tabelle 6.1.: Flüssigkeitseigenschaften und geometrische Parameter der Kollision gleichgroßer Tropfen mit unterschiedlicher Viskosität

trägt 100 μ s. Der niedrigviskose Tropfen besteht aus einer wässrigen Lösung von 5 % Polyvinylpyrrolidon (PVP) K30, der höherviskose Tropfen enthält 25 % PVP. Beide Lösungen weisen newtonsche Rheologie auf^[115]. Die relevanten Materialparameter sind in Tabelle 6.1 aufgelistet.

Das Rechengebiet für die Simulation ist ein Würfel mit $2 \cdot 10^{-3}$ m Kantenlänge, aufgelöst mit $256 \times 256 \times 128$ Zellen mit einer Symmetrieebene. Die Tropfen werden mit ca. 90 Zellen/D₀ aufgelöst. Unterschiede in Dichte und Oberflächenspannung der Tropfen sind klein und werden in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt; stattdessen wird das arithmetische Mittel der gemessenen Werte in der Simulation verwendet. Dadurch ergeben sich Abweichungen von 2.2 % in der Dichte und 4.4 % in der Oberflächenspannung. In der Simulation wird die Koaleszenz um 584 μ s verzögert. Das Setup ist in Tabelle A.4 zusammengefasst.

Das Postprocessing erfolgt mit dem Raytracing Programm *POV-Ray*^[76]. Ein Raytracing-Programm berechnet den Weg von Lichtstrahlen und berücksichtigt den physikalische Brechungsindex der Flüssigkeit. Folglich unterliegt die Darstellung der inneren Grenzfläche in den Simulationsergebnissen demselben Brechungsindex wie in den experimentellen Bildern. Dies vereinfacht den Vergleich der experimentellen und numerischen Ergebnisse bezüglich der äußeren Form des Stoßkomplexes sowie der Geometrie der flüssig-flüssig-Grenzfläche im Inneren des Kollisionskomplexes.

Abbildung 6.4 zeigt die Bildung von Blasen in der Nähe der flüssig-flüssig-Grenzfläche in den Simulationsergebnissen. Diese Blasen entstehen durch das Einschließen von Luft. Der Einschluss von Luftblasen in der Simulation einer binären Tropfenkollisionen wird von Passandideh-Fard und Roohi (2006)^[90] als physikalischer Vorgang beschrieben. Dagegen spricht, dass ein numerischer Grund für den Einschluss von Luftblasen besteht. In einem VOF-Code wird der Fluss über eine Zellfläche mittels geometrischer Rekonstruktion berechnet. Diese Rekonstruktion versagt, wenn zwei Grenzflächen in einer Zelle auftreten, und führt dazu, dass die Luft

zwischen zwei sich annähernden Tropfen nicht nach außen verdrängt werden kann, sondern eingeschlossen wird. Daher ist nicht klar, ob der Einschluss von Luftblasen in der Simulation dem physikalischen Verhalten entspricht. Um den Einfluss dieses Lufteinschlusses abzuschätzen, wurde eine Simulation durchgeführt, bei der die eingeschlossene Luft kurz nach dem Kontakt der Tropfen durch Flüssigkeit ersetzt wurde. Die Entwicklung der Stoßkomplexgeometrie sowie die Verteilung der hoch- und niedrigviskosen Flüssigkeit wurde analysiert und es konnte keine signifikante Abweichung festgestellt werden. Daher wird diesen Blasen hier kein signifikanter Einfluss auf die Kollisionsdynamik zugeschrieben.

Die experimentellen Bilder zeigen eine graue Übergangszone zwischen dem hellen und dem dunklen Teil des Kollisionskomplexes ca. 1 ms nach der Kollision, siehe Abb. 6.4. Der Ursprung dieser Übergangszone ist in den experimentellen Bildern nicht klar erkennbar; mögliche Gründe sind eine Mischzone oder eine gekrümmte flüssig-flüssig-Grenzfläche. Die Visualisierung der Simulationsergebnisse mittels Raytracing erlaubt einen Einblick in den Kollisionskomplex und zeigt, dass die Übergangszone das Ergebnis einer gekrümmten flüssig-flüssig-Grenzfläche ist. Die Experimente zeigen, in welchen Zonen des Kollisionskomplexes sich eine oder mehrere Flüssigkeiten befinden, die interne Grenzflächengeometrie kann lediglich durch die vollständig aufgelöste numerische Simulation erhalten werden.

Zeitskala der Koaleszenz

Die Zeit vom ersten Kontakt der Oberflächen bis zum Verschwinden des Spaltes sollte bekannt sein oder zumindest geschätzt werden. Dies ist ein ausführlich untersuchtes Problem, siehe z. B. Oguz und Prosperetti (1988)^[80], Hopper (1993)^[52] und Eggers et al. (1999)^[30]. Oguz und Prosperetti^[80] leiten eine Gleichung her, um die Rückzugsgeschwindigkeit des Spaltes in Abhängigkeit von der Spaltbreite zu schätzen; das Modell ist auf reibungsfreie Strömungen begrenzt. Die Rückzugsgeschwindigkeit des Spaltes in einer viskosen Flüssigkeit soll mithilfe einer Simulation eines vereinfachten Problems abgeschätzt werden. Die Idee besteht darin, nur die Spaltregion mit einer sehr kleinen Spaltbreite zu simulieren. Das Setup ist ein rechteckiges Recheng Gebiet mit der Größe $200 \times 200 \times 25 \mu\text{m}^3$. Es ist großteils mit Flüssigkeit gefüllt ($\eta = 30 \text{ mPas}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$), der Spalt ist gefüllt mit Luft ($\eta = 0.018 \text{ mPas}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$), die Oberflächenspannung beträgt $\sigma = 6.5 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$. Das Rechengebiet hat drei Symmetrieränder. An den anderen Rändern wurde eine homogene Neumann-Randbedingung für die Geschwindigkeit in Verbindung mit atmosphärischem Druck verwendet (atmosphärische Randbedingung). Das Rechengebiet wird mit 17 Millionen Zellen aufgelöst; die Spaltbreite wird mit einem Minimum von 4 Zellen aufgelöst. In der Mitte des Spaltes verbindet eine kleine Flüssigkeitsbrücke die Flüssigkeit mit der Symmetrieebene. Das Setup ist in Abbildung 6.5 dargestellt.

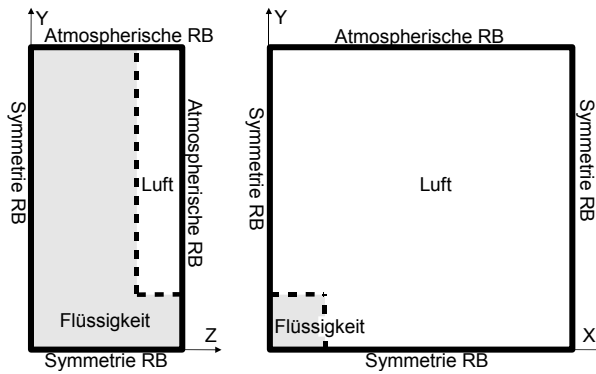


Abb. 6.5.: Setup der Simulation des Spaltes, um die Zeitskala vom ersten Kontakt bis zum vollständigen Verschwinden des Spaltes zu untersuchen.

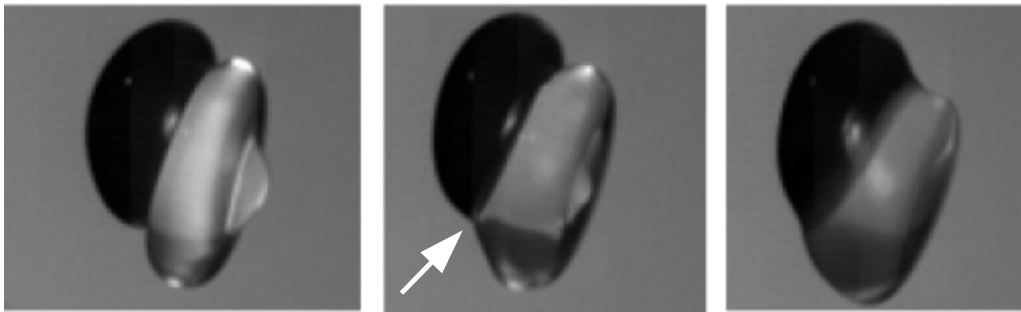


Abb. 6.6.: Experimentelle Bilder des Stoßkomplexes, während die beiden Tropfen verschmelzen (von Prof. Sommerfeld, MLU Halle-Wittenberg). Die Koaleszenz beginnt im unteren Bereich im mittleren Bild (mit einem Pfeil markiert) und ist im rechten Bild abgeschlossen.

Die Spaltbreite wird sukzessiv in mehreren Simulationen reduziert, um eine Beziehung zwischen Spaltbreite und Rückzugsgeschwindigkeit zu finden. Die simulierten Spaltbreiten sind $12.5\,\mu\text{m}$, $6.25\,\mu\text{m}$, $3.125\,\mu\text{m}$ und $1.56\,\mu\text{m}$. Die entsprechenden Rückzugsgeschwindigkeiten sind $1.51 \cdot 10^{-2}\,\text{m/s}$, $1.70 \cdot 10^{-2}\,\text{m/s}$, $1.84 \cdot 10^{-2}\,\text{m/s}$ und $1.85 \cdot 10^{-2}\,\text{m/s}$, zum Zeitpunkt $t = 8 \cdot 10^{-5}\,\text{s}$ nach Simulationsbeginn. Diese Skalen sind größer als die Spaltbreite, die bei Bouncing beobachtet wurde^[64], kleinere Spaltbreiten können jedoch derzeit in einer Direkten Numerischen Simulation nicht simuliert werden. Die Rückzugsgeschwindigkeit des Spaltes konvergiert offensichtlich für die kleinsten untersuchten Spaltweiten auf einen festen Wert. Die benötigte Zeit für das Verdrängen der Luft beträgt minimal ca. 120 ms. Unter der Annahme, dass sich zumindest die Größenordnung auch in den Experimenten einstellt, sollte der Vorgang des Zurückziehens des Spaltes in den experimentellen Bildern sichtbar sein.

Tatsächlich ist der Vorgang des Zurückziehens indirekt sichtbar, wie Abbildung 6.6 zeigt. Der erste Kontakt scheint nicht in der Mitte zwischen den beiden Tropfen zu

entstehen, da im mittleren Bild die Tropfen im unteren Bereich bereits verschmolzen sind, aber in dem oberen Bereich noch getrennt sind. Vermutlich ist der Spalt im unteren Bereich bereits verschwunden, dagegen im oberen Bereich noch vorhanden. Wenn die Zeit für das Verschmelzen der Grenzfläche sehr klein wäre oder wenn die ganze Kontaktzone auf einmal verschmelzen würde, könnte kein Bild wie das dargestellte existieren. In diesem Fall wäre die Zeitskala der Glättung des Knicks in der Oberfläche größer als die Zeitskala, auf welcher der Spalt verschwindet und somit würde der Knick auf beiden Seiten gleichmäßig abgerundet werden. Eine quantitative Validierung der in der Simulationsstudie gefundenen Zeitskala ist mit den verfügbaren experimentellen Daten nicht möglich. Dennoch unterstützen die Bilder die gefundene Größenordnung der Zeit vom Verschmelzen der Oberfläche bis zum Verschwinden des Spaltes.

Symmetriebrechung aufgrund der Viskositätsdifferenz

Die Symmetriebrechung bei der Kollision eines niedrig- mit einem hochviskosen Tropfen gleicher Größe zeigt sich zu Beginn in der stärkeren Verformung des niedrigviskosen Tropfens. Nach 1 ms kann eine Wölbung auf der Seite des niedrigviskosen Tropfens beobachtet werden, der sich nach ca. 0.5 ms zurückzieht. Die Bildung der Wölbung kann ohne temporäre Unterdrückung der Koaleszenz nicht vorhergesagt werden, sodass dieser Effekt eine Folge der verzögerten Koaleszenz ist. Ein Vergleich der Ergebnisse von Simulationen mit und ohne verzögerte Koaleszenz ist in Abbildung 6.7 dargestellt.

Kollision eines hochviskosen mit einem niedrigviskosen Tropfen unterschiedlicher Größe

Abbildung 6.8 zeigt experimentelle Bilder und Simulationsergebnisse einer Kollision zwischen einem kleinen hochviskosen und einem größeren niedrigviskosen Tropfen. Die Materialparameter sind die gleichen wie bei der Kollision in Abschnitt 6.3. Die Weber-Zahl beträgt 78.7, das Durchmesser-Verhältnis $D_0^{\text{hv}}/D_0^{\text{lv}} \approx 0.66$, der Kollisionsparameter ist 0.34 und das Viskositätsverhältnis beträgt $\eta^{\text{hv}}/\eta^{\text{lv}} \approx 23$. Die Verzögerung der Koaleszenz ist kurz, ca. 100 – 200 μs . Die Parameter der Simulation sind in Tabelle A.5 aufgelistet. Die Simulationsergebnisse werden, wie oben erläutert, unter Verwendung der Raytracing-Technik visualisiert. Abb. 6.8 zeigt, wie der Tropfen mit höherer Viskosität in den niedrigviskosen Tropfen eindringt. In der unteren Reihe ist sichtbar, dass der hochviskose Tropfen nicht vollständig umschlossen wird, sondern ein dünnes Ligament entsteht, das den hochviskosen Tropfen mit der Oberfläche des Kollisionskomplexes verbindet.

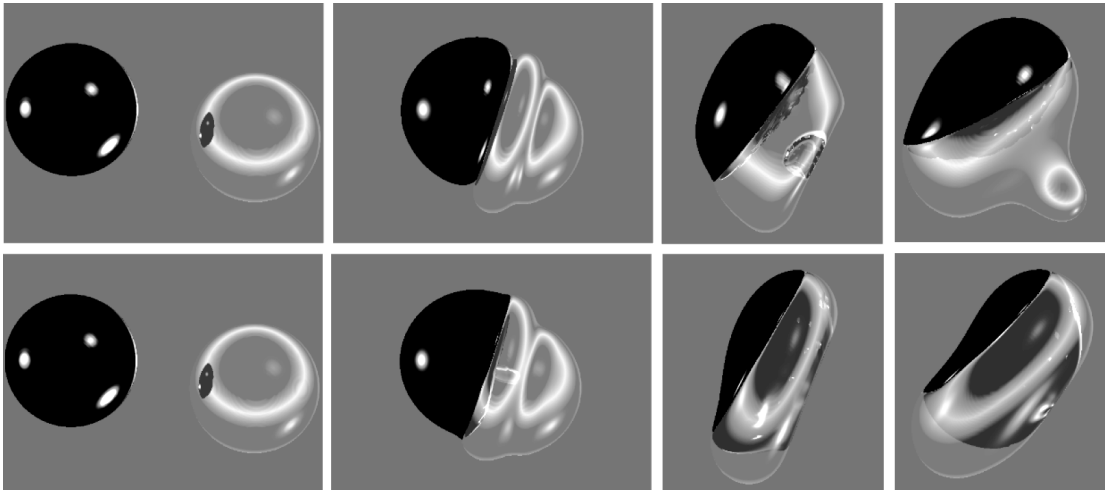


Abb. 6.7.: Vergleich simulierter Kollisionen ungleich viskoser Tropfen mit verzögerter Koaleszenz (obere Reihe) und ohne (untere Reihe). Das Zeitintervall zwischen zwei Bildern ist $500\,\mu\text{s}$. Die Simulation ohne verzögerte Koaleszenz kann die signifikante Wölbung im Bereich der niedrigviskosen Flüssigkeit nicht erfassen.

Analyse des Geschwindigkeitsfeldes

Das Geschwindigkeitsfeld in Abbildung 6.9 zeigt, dass die Geschwindigkeit in dem hochviskosen Tropfen (links im Bild 6.9) nahezu homogen ist, während im niedrigviskosen Tropfen eine starke Umlenkung der Geschwindigkeit vorherrscht. In der Nähe der flüssig-flüssig Grenzfläche existiert in der niedrigviskosen Flüssigkeit eine hydrodynamische Grenzschicht; bei $t = 200\,\mu\text{s}$ beträgt die Dicke ca. $15\,\mu\text{m}$.

Analyse des Druckfeldes

Die Bildsequenz in Abb. 6.10 zeigt das Druckfeld im Inneren des Kollisionskomplexes kurz nach der Kollision. Die Koaleszenz erfolgt zwischen dem ersten und dem zweiten Bild; die Koaleszenzverzögerung führt zu einem Knick zwischen den Grenzflächen. In dem zweiten Bild ist der Knick verschwunden.

Ein Drucksprung ist sichtbar zwischen den beiden Flüssigkeiten bei allen gezeigten Bildern. 100 ms nach Kontakt beträgt der Drucksprung $\Delta p = 1050\,\text{Pa}$ an der flüssig-flüssig Grenzfläche in der Mitte des Kollisionskomplexes (linkes Bild in der oberen Reihe in Abb. 6.10). Der Drucksprung nimmt mit der Zeit ab, siehe Tab. 6.2.

Um den Maximalwert des Drucksprungs abzuschätzen, wird der Druckanstieg aufgrund einer vollständigen Abbremsung des Fluides berechnet. In diesem Fall kann

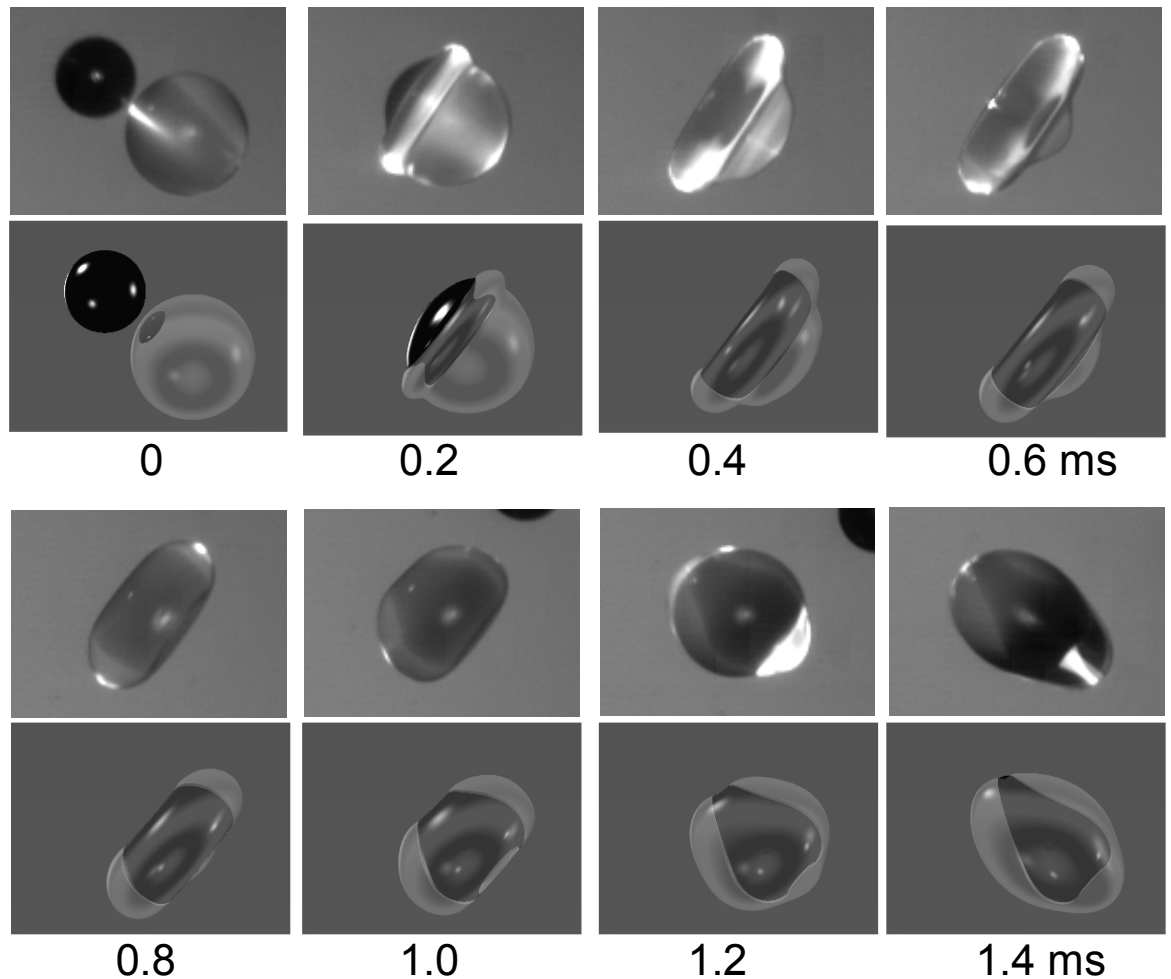


Abb. 6.8.: Experiment und Simulation eines kleinen hochviskosen Tropfens, der mit einem größeren niedrigviskosen Tropfen kollidiert. Die experimentellen Bilder sind jeweils in der oberen Reihe dargestellt (von Prof. Sommerfeld, MLU Halle-Wittenberg), die entsprechenden Simulationsergebnisse darunter.

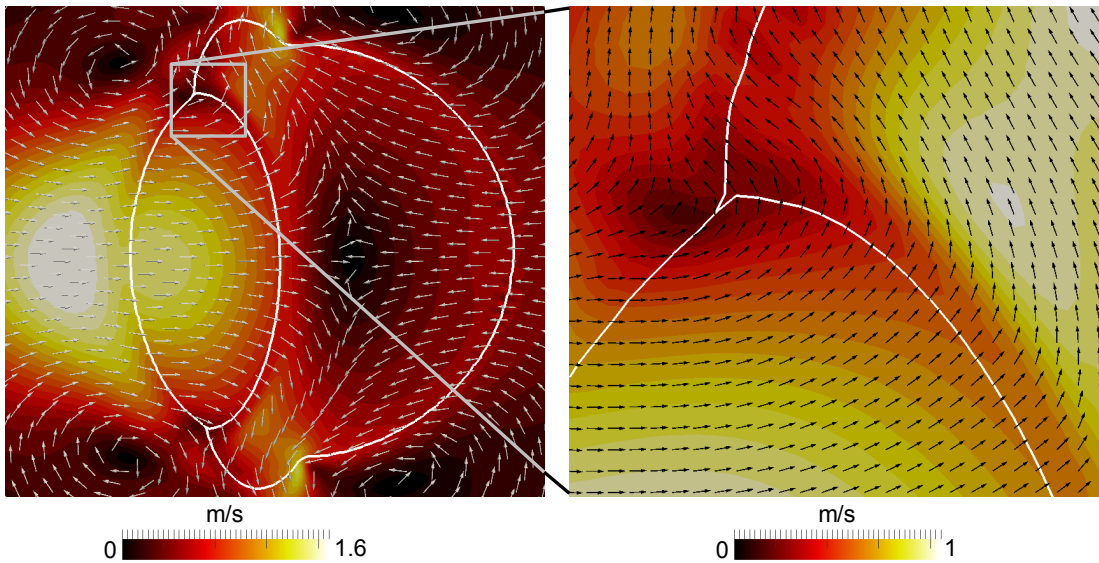


Abb. 6.9.: Simuliertes Geschwindigkeitsfeld. Der kleinere hochviskose Tropfen kommt von links und kollidiert mit dem größeren niedrigviskosen Tropfen. Linkes Bild: Gesamtansicht, Bild rechts: Detailansicht des Tripelpunktes von Luft, niedrigviskoser und hochviskoser Flüssigkeit $200\mu\text{s}$ nach Kontakt.

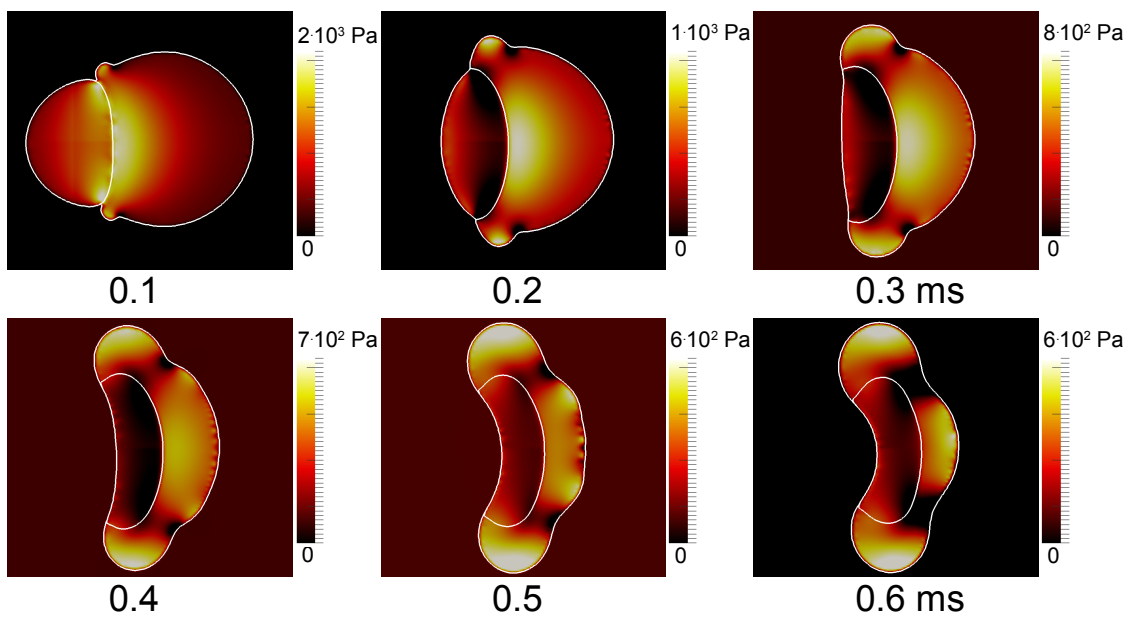


Abb. 6.10.: Simulierter Druck im Inneren des Kollisionskomplexes.

| Zeit nach Kontakt | Drucksprung |
|-------------------|-------------|
| 0.1 ms | 1050 Pa |
| 0.2 ms | 975 Pa |
| 0.3 ms | 840 Pa |
| 0.4 ms | 510 Pa |
| 0.5 ms | 250 Pa |

Tabelle 6.2.: Zeitliche Entwicklung des Drucksprungs.

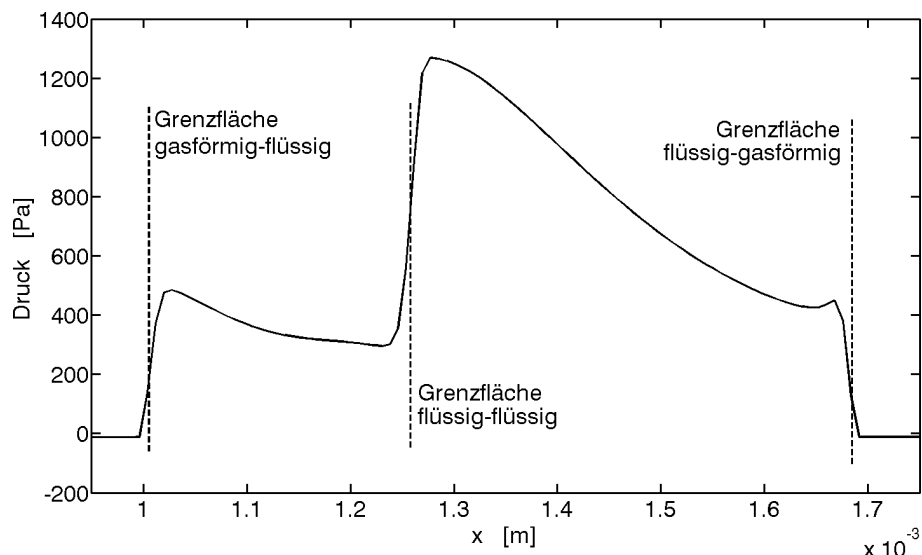


Abb. 6.11.: Druckverteilung im Tropfen in x-Richtung entlang der Mittellinie, 0.2 ms nach Kontakt.

der Maximalwert des Drucksprungs mittels Bernoulli-Gleichung geschätzt werden, d.h.

$$p + \rho g z + \frac{\rho}{2} u^2 = \text{const.} \quad (6.4)$$

Für die Geschwindigkeit wird $u = U_{\text{rel}}/2$ gewählt, somit ergibt Gl. 6.4 einen Staudruck von 1020 Pa. Dieses vereinfachte Modell sagt den maximalen Drucksprung mit einer Genauigkeit von 3 % voraus.

Analyse des Drucksprungs an der Grenzfläche

Die Druckverteilung innerhalb des Kollisionskomplexes entlang der x-Achse bei $t = 0.2 \text{ ms}$ ist in Abbildung 6.11 dargestellt. Der Maximaldruck tritt im Inneren der niedrigviskosen Flüssigkeit direkt neben der inneren Grenzfläche auf. Drei Positionen, die einen Drucksprung aufweisen, können beobachtet werden. Zwei befinden sich an der Oberfläche des Tropfens und eine an der inneren Grenzfläche. Um den Grund für die Sprünge im Druckfeld besser zu verstehen, werden die Sprungbedingungen an diesen Positionen theoretisch abgeschätzt. Die Impulssprungbedingung

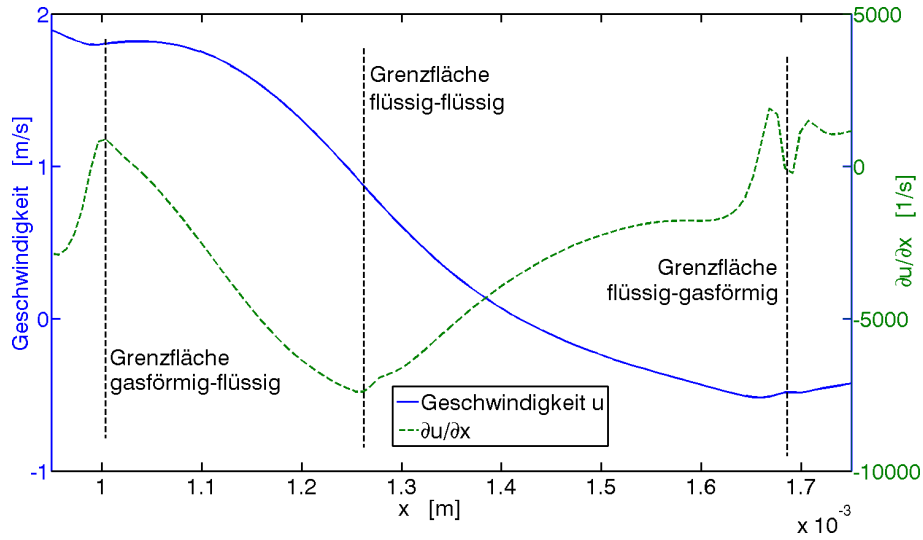


Abb. 6.12.: Geschwindigkeit und der Geschwindigkeitsgradient in x-Richtung im Inneren des Stoßkomplexes bei $t = 0.2$ ms.

an den Grenzflächen ist durch Gleichung 2.16 gegeben. Für die Normalkomponente der Sprungbedingung in Gl. 2.16 gilt

$$[[p]] = \mathbf{n}_\Sigma \cdot [[\mathbf{S}]] \cdot \mathbf{n}_\Sigma + \sigma \kappa. \quad (6.5)$$

Für eine Grenzfläche, die rechtwinklig zur x-Achse orientiert ist, reduziert sich Gleichung 6.5 zu

$$p_2 - p_1 = 2\eta_2 \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_2 - 2\eta_1 \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_1 + \sigma \kappa. \quad (6.6)$$

Die Geschwindigkeit in x-Richtung und deren Ableitung ist in Abbildung 6.12 dargestellt. In der Nähe der flüssig-flüssig-Grenzfläche beträgt die Ableitung $\partial u / \partial x$ 7400 1/s, womit sich für $p_2 - p_1$ 850 Pa ergeben. Dies ist nicht exakt der im Druckfeld beobachtete Wert; der Grund für diese Abweichung wird weiter unten diskutiert.

An der gasförmig-flüssig-Grenzfläche wirkt die viskose Spannung und die Oberflächenspannung. Um das Verhältnis der Oberflächenspannung zu viskoser Spannung abzuschätzen, wird die Krümmung der Grenzfläche unter Verwendung von Höhenfunktionen^[25] berechnet. Die Genauigkeit der Krümmungsberechnung, ermittelt aus einem Vergleich mit der bekannten Krümmung einer Kugel, ist besser als 1 %. An der Grenzfläche zwischen Luft und hochviskoser Flüssigkeit wird ein Drucksprung von 449 Pa in den Simulationen beobachtet. Die Abschätzung des Drucksprungs mit Gleichung 6.6 ergibt einen Betrag von 106 Pa für den viskosen Stress und 369 Pa aufgrund von Oberflächenspannung. Die Summe des geschätzten Drucksprungs ist 456 Pa, 1.5 % weniger als in der Simulation. An der Grenzfläche zwischen niedrigviskoser Flüssigkeit und Luft ergibt sich für die viskose Spannung ein Beitrag von nur 1.2

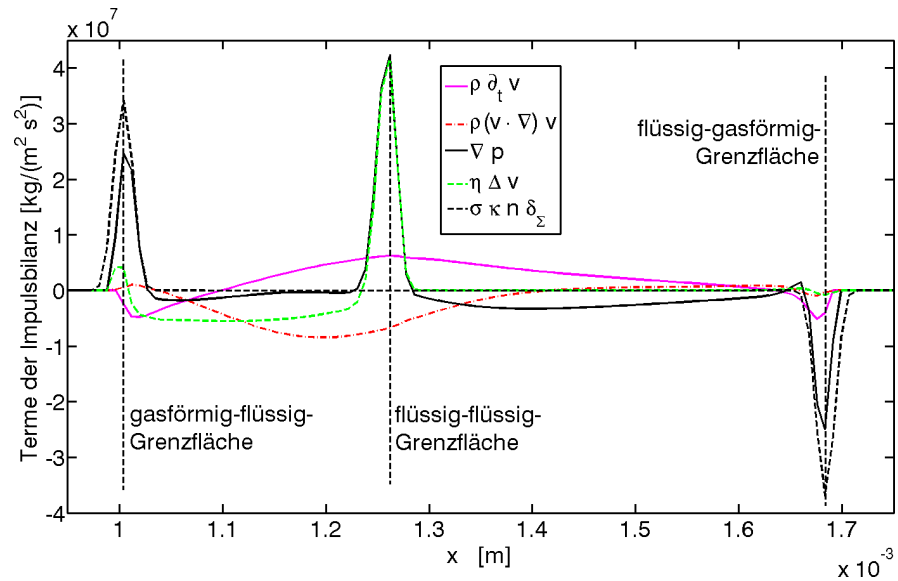


Abb. 6.13.: Visualisierung der verschiedenen Terme in der Impulsbilanz in x-Richtung innerhalb des Stoßkomplexes bei $t = 0.2$ ms.

Pa aufgrund der niedrigen Flüssigkeitsviskosität. Der Oberflächenspannungsbeitrag wird auf 350 Pa geschätzt, der tatsächliche Drucksprung in der Simulation ist 100 Pa höher.

Um die Differenz zwischen dem geschätzten und dem simulierten Drucksprung zu verstehen, werden alle Terme der Impulsbilanz (Gl. 2.2) analysiert. Abbildung 6.13 zeigt die verschiedenen Terme der Impulsbilanz. Die dominierende Komponente an der inneren Grenzfläche ist der Druckgradient ∇p , balanciert durch die viskose Komponente $\eta \Delta \mathbf{v}$. Die instationäre Komponente $\rho \partial_t \mathbf{v}$ beträgt 15 % des maximalen Druckgradienten, die Trägheitskomponente $\rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}$ beträgt 16 %. An der Grenzfläche zwischen niedrigviskoser Flüssigkeit und Luft hat die instationäre Komponente der Impulsbilanz $\rho \partial_t \mathbf{v}$ ein lokales Maximum von 20 % des Druckgradienten. Der instationäre Term ist in der Schätzung des Drucksprungs nicht enthalten und erzeugt die Abweichung von geschätztem zu simuliertem Drucksprung. Die Gesamtbilanz für den Impuls (Gl. 2.17) wird in den Simulationen nahezu exakt erfüllt, die maximale Abweichung beträgt $5 \cdot 10^{-5} \%$.

Phasen bei der Kollision zwischen einem kleinen hochviskosen und einem größeren niedrigviskosen Tropfen

Die numerischen Simulationen erlauben die Identifikation unterschiedlicher Phasen der Kollision. Eine Skizze der Phasen ist in Abbildung 6.14 dargestellt. In der ersten Phase kollidieren die Tropfen und verschmelzen kurz nach der Kollision. In der zweiten Phase dringt der hochviskose Tropfen in den niedrigviskosen ein, dabei

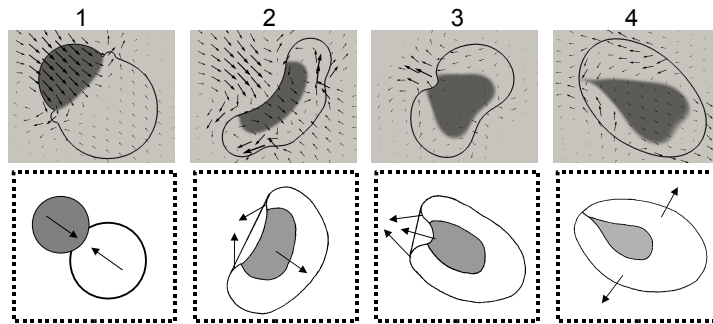


Abb. 6.14.: Phasen bei der Kollision zwischen einem kleinen hochviskosen und einem größeren niedrigviskosen Tropfen.

bildet sich eine konvexe Krümmung auf der Stoßkomplexoberfläche. In Phase 3 bildet sich die konvexe Krümmung der Oberfläche zurück. Dabei zieht sie eine kleine Menge hochviskoser Flüssigkeit in Richtung Oberfläche. Das Ergebnis ist ein dünnes Ligament, welches die hochviskose Flüssigkeit im Inneren des Kollisionskomplexes mit der Oberfläche verbindet. Somit erfolgt nach dem ersten Kontakt der Tropfen keine Topologieänderung. In Phase 4 ist eine gedämpfte Schwingung des Tropfens zu beobachten. Die Bildung eines dünnen Ligaments, welches die hochviskose Flüssigkeit im Inneren mit der Oberfläche des resultierenden Tropfens verbindet, ist ein wichtiger Effekt und muss berücksichtigt werden, wenn eine vollständige Umschließung gefordert ist, z. B. bei der Produktion von verkapselten Wirkstoffen in der Medizintechnik.

Fazit

Kollisionen zwischen einem hoch- und einem niedrigviskosen Tropfen werden untersucht. Die numerische Methode wird durch die Lösung einer zusätzlichen Transportgleichung erweitert, um die Verteilung des Polymermassenanteils innerhalb des Stoßkomplexes zu erhalten. Die Viskosität ist an den Massenanteil gekoppelt und eine sorgfältige Mittelung wird an der Flüssig-Flüssig-Grenzfläche durchgeführt, um die Dynamik der Grenzfläche zu erfassen. Der experimentell beobachtete Effekt einer verzögerten Koaleszenz ist eine Herausforderung für die Simulation, da der Luftspalt zwischen den Tropfen aufgrund der Skalenunterschiede von Spalt und Tropfendurchmesser nicht erfasst werden kann. Um das verzögerte Verschmelzen in der Numerik zu reproduzieren, wird ein Algorithmus entwickelt, der die Topologieänderung der dispersen Phase temporär unterdrückt. Numerische Experimente zeigen, dass die Unterdrückung der Koaleszenz die Physik der Tropfenkollision nicht verfälscht. Das numerische Verfahren wird durch den Vergleich mit experimentellen Daten einer Kollision von einem hoch- und einem niedrigviskosen Tropfen gleicher Größe validiert und zeigt, dass die Erweiterungen gut geeignet sind, Zweiphasenströmungen mit unterschiedlicher Viskosität der Dispersphase zu simulieren.

Die Methode wird verwendet, um die Kollision zwischen einem kleinen hochviskosen Tropfen und einer größeren niedrigviskosen Tropfen zu simulieren. Eine Übergangszone zwischen hoch- und niedrigviskoser Flüssigkeit innerhalb des Stoßkomplexes in den experimentellen Bildern kann mittels Simulation auf eine Krümmung der inneren Flüssigkeit-Flüssigkeit-Grenzfläche zurückgeführt werden. Das Eindringen des hochviskosen Tropfens in den niedrigviskosen Tropfen wird in Übereinstimmung mit dem Experiment vorhergesagt. Darüber hinaus wird in den Simulationen ein dünnes Ligament identifiziert, welches die hochviskose Flüssigkeit im Inneren des Kollisionskomplexes mit der Oberfläche verbindet.

Die Strömung im Inneren des Stoßkomplexes wird untersucht, um die Ursache des Drucksprunges an der Flüssig-Flüssig-Grenzfläche zu verstehen. Die Druckdifferenz kann als dynamischer Druck der Tropfen mit der Bernoulligleichung abgeschätzt werden. Der Drucksprung an der Flüssig-Flüssig-Grenzfläche ist größer als der Sprung an der Flüssig-Luft-Grenzfläche, obwohl keine Oberflächenspannung vorhanden ist. Als Ursache wird die Viskositätsdifferenz in Kombination mit einem hohen Geschwindigkeitsgradienten in der Nähe der Flüssig-Flüssig-Grenzfläche identifiziert. Auch an der Grenzfläche zwischen hochviskoser Flüssigkeit und Luft hat die Viskositätsdifferenz einen signifikanten Beitrag zur Druckdifferenz, das Verhältnis der Impulsbeiträge von Viskosität zu Oberflächenspannung beträgt 1 : 3.5.

7 Kollision von Tropfen mit scherratenabhängiger Viskosität

Um die Kollision von Polymertropfen zu beschreiben, muss die nichtnewtonsche Viskosität berücksichtigt werden. Ein scherverdünnendes Verhalten, möglicherweise in Kombination mit elastischen Fließeigenschaften, wird bei fast allen makromolekularen Flüssigkeiten beobachtet^[8] und muss beispielsweise bei Lackierverfahren, Beschichtungen sowie der Produktion partikulärer Produkte mittels Sprühverfahren berücksichtigt werden.

Experimentelle Bilder binärer Tropfenkollisionen einer newtonschen und einer scherverdünnenden Flüssigkeit sind in Abbildung 7.1 dargestellt (entnommen von Motzigemba et al.^[69]). Bei ähnlicher Weber- und Reynoldszahl ist der Durchmesser des Stoßkomplexes im newtonschen Fall kleiner als in dem nichtnewtonschen Fall. Die Reynoldszahl wird im Fall der scherverdünnenden Flüssigkeit mit η_0 gebildet (η bei Scherrate null, siehe Kapitel 7.1). Im Fall der scherverdünnenden Flüssigkeit ist eine torusförmige Stoßkomplexgeometrie mit einem dünnen Flüssigkeitsfilm im Zentrum zu erkennen.

7.1 Modellierung und Implementierung

Scherverdünnendes Verhalten wird mathematisch als eine generalisiert-newtonsche Flüssigkeit beschrieben, d.h. die lokale Viskosität wird mittels einer gegebenen Funktion der lokalen Scherrate modelliert. Diese Klasse von Flüssigkeiten umfasst mehrere Modelle wie Power-Law Flüssigkeiten (auch als Ostwald-de Waele Fluide bekannt) sowie Carreau-, Carreau-Yasuda- und Cross-Flüssigkeiten.

Die Impulsänderung aufgrund viskoser Kräfte wird, wie in Kapitel 3.4 beschrieben, explizit diskretisiert. Eine implizite Diskretisierung wäre ebenfalls denkbar, hat sich allerdings als nicht notwendig erwiesen. Die Vorgehensweise zur Berechnung der Impulsänderung ist:

1. Zunächst werden die Geschwindigkeitsgradienten mittels zentraler Differenzen berechnet. Für die Berechnung der Gradienten wird das Geschwindigkeitsfeld des letzten Zeitschritts genutzt. Die Scherraten werden gemäß

$$\dot{\gamma} = \left[4 \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} \right)^2 + 4 \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right)^2 + 4 \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_3} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_3} + \frac{\partial v_3}{\partial x_1} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_3} + \frac{\partial v_3}{\partial x_2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (7.1)$$

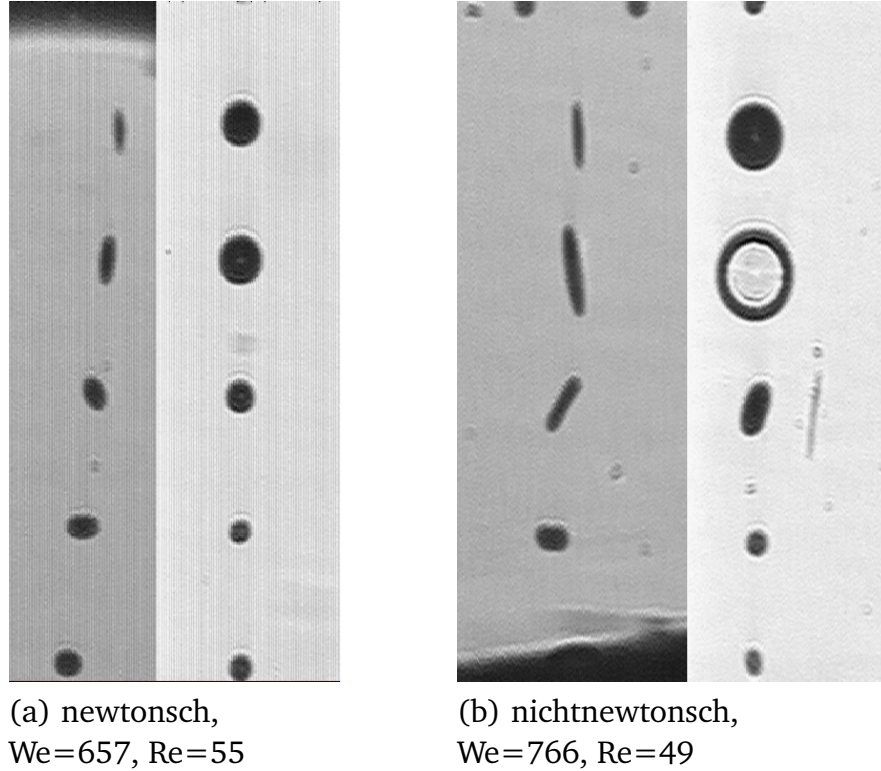


Abb. 7.1.: Binäre Tropfenkollisionen, aus Motzigemba et al.(2002)^[69].

berechnet. Ableitungen des Typs $\frac{\partial v_i}{\partial x_j}$, $i = j$ werden mittels zentraler Differenzen der angrenzenden Zellflächenwerte diskretisiert. Für die gemischten Ableitungen ($\frac{\partial v_i}{\partial x_j}$, $i \neq j$) werden zuerst in den Zellen $j+1$ und $j-1$ die zellzentrierten Geschwindigkeiten als arithmetisches Mittel der angrenzenden Zellflächenwerte berechnet. Anschließend wird die Ableitung als zentrale Differenz der zellzentrierten Werte berechnet.

2. Die Viskosität η wird gemäß Modellgleichung in Abhängigkeit von der Scherrate berechnet. In dieser Arbeit kommt ein modifiziertes Power-Law gemäß

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{K\eta_0}{K + \eta_0\dot{\gamma}^{1-n}} \quad (7.2)$$

zum Einsatz mit der Viskosität η_0 bei Scherrate null und den Modellparametern K und n . Die Modellparameter werden per Anpassung nach einem Least-Squares-Verfahren ermittelt. Die Viskosität im Bereich der Phasengrenzfläche wird im nichtnewtonschen Fall analog zu dem newtonschen Fall berechnet.

-
3. Nachdem die Scherspannungen gemäß Gleichung 2.3 berechnet wurden, ist der letzte Schritt die Berechnung der Impulsänderung aufgrund viskoser Reibung und Update der Geschwindigkeit nach

$$\tilde{\mathbf{v}} = \dot{\mathbf{v}} + \frac{\Delta t}{\rho V} \int_A \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} dA, \quad (7.3)$$

wobei $\dot{\mathbf{v}}$ die temporäre Geschwindigkeit nach den Teilschritten „Aufprägen des konvektiven Impulstransports“ und „Aufprägen der Körperkräfte“ bezeichnet. Die phasenabhängige Dichte ρ wird gemäß Gl. 3.4 berechnet. Für weitere Details siehe Kapitel 3.

7.2 Verifizierung und Validierung

In dem vorliegenden Kapitel wird die Verifizierung und Validierung des Volume-of-Fluid Codes FS3D für scherverdünnende Fluide beschrieben. Verifizierung bezeichnet dabei die Überprüfung, ob der CFD-Code die implementierten Gleichungen richtig löst. Mittels Validierung wird überprüft, ob die richtigen Gleichungen gelöst werden, d.h. ob die Physik richtig erfasst wird^[104]. Die Verifizierung kann durchgeführt werden, indem die numerische Lösung eines Testfalls mit einer analytischen Lösung verglichen wird. Eine Validierung erfolgt in der Regel durch den Vergleich mit experimentellen Daten.

Verifizierung

Die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen mit scherratenabhängiger Viskosität mittels FS3D muss verifiziert werden, wobei sowohl die Geschwindigkeiten im Bulk als auch die Dynamik der Grenzfläche analysiert wird. Die Testfälle sollen sowohl den Fall einer tangentialen Grenzflächenbewegung als auch die Bewegung der Grenzfläche in Normalenrichtung abdecken. Diese Anforderungen werden von einer druckgetriebenen Zweiphasen-Spaltströmung sowie dem 2D-Bretherton Problem erfüllt. In beiden Fällen wird die numerische Simulation mit einer analytischen Lösung verglichen.

Verifizierung: Zweiphasige Spaltströmung

Um die tangentielle Bewegung des Interfaces in scherverdünnender Flüssigkeit zu testen, wurde eine druckgetriebene laminare Zweiphasenströmung einer Power-Law-Flüssigkeit und einer newtonschen Flüssigkeit zwischen zwei stationären parallelen

Platten von unendlicher Ausdehnung gewählt. Für eine Power-Law-Flüssigkeit ist die Viskosität als $\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\text{NN}} \dot{\gamma}^{n-1}$ mit den Modellparametern η_{NN} und n gegeben^[43]. Die Geometrie des Problems ist in Abbildung 7.2 dargestellt. Die Größe des Rechengebiets liegt bei 0.08 m in x-Richtung und 0.02 m in y-Richtung und wurde mit 128×32 Zellen aufgelöst.

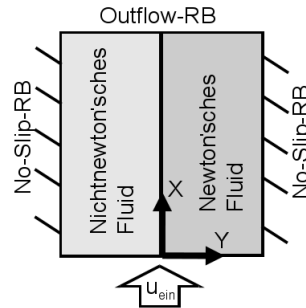


Abb. 7.2.: Setup der zweiphasigen Spaltströmung.

Eine analytische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen für eine Zweiphasenströmung kann für $n = 1/2$ gefunden werden. Zusätzlich zu den Vereinfachungen und Randbedingungen einer einphasigen Spaltströmung müssen die Kopplungsbedingungen an der Grenzfläche berücksichtigt werden. Zum einen müssen die Geschwindigkeiten $u(y = 0+)$ und $u(y = 0-)$ gleich sein. Des Weiteren müssen die Tangentialspannungen an der Grenzfläche im Gleichgewicht sein, d.h. $\mathbf{S}(y = 0+) \cdot \mathbf{n}_\Sigma = \mathbf{S}(y = 0-) \cdot \mathbf{n}_\Sigma$. Das Viskositätsverhältnis muss so eingestellt werden, dass das Geschwindigkeitsmaximum in dem Bereich der newtonschen Flüssigkeit liegt. Am Ort des Geschwindigkeitsmaximums ist die Scherrate null und bei einer Power-Law-Flüssigkeit wäre folglich auch $\eta(\dot{\gamma})$ null. Dies wäre nicht mit experimentellen Beobachtungen in Übereinstimmung und würde außerdem zu Problemen in der Numerik führen, da reibungsfreie Strömungen in FS3D nicht berechnet werden können.

Das Geschwindigkeitsprofil ist in Abbildung 7.3 dargestellt. Die numerische Lösung stimmt sehr gut mit der analytischen überein, der Fehler der maximalen Geschwindigkeit liegt unter 1 %. Das Geschwindigkeitsfeld der Spaltströmung ist in Abb. 7.4 dargestellt und zeigt ein nicht triviales Geschwindigkeitsfeld aufgrund der Einlaufstrecke. Die analytisch berechnete Geschwindigkeitsverteilung ergibt sich in ausreichender Entfernung zum Einlass.

Verifizierung: Bretherton Problem

Die Verdrängung einer newtonschen Flüssigkeit durch eine Gasblase in einem Spalt wird mit der asymptotischen Lösung des zweidimensionalen Bretherton Problems^[17] verglichen. Die Berechnung der Grenzschichtdicke zwischen Gasblase und Rand unterscheidet sich in Abhängigkeit von der Kapillarzahl $Ca = \frac{\eta U_B}{\sigma}$ mit der Geschwindigkeit des Blasenschwerpunkts U_B . In Bretherton (1961)^[17] sind Gleichungen für

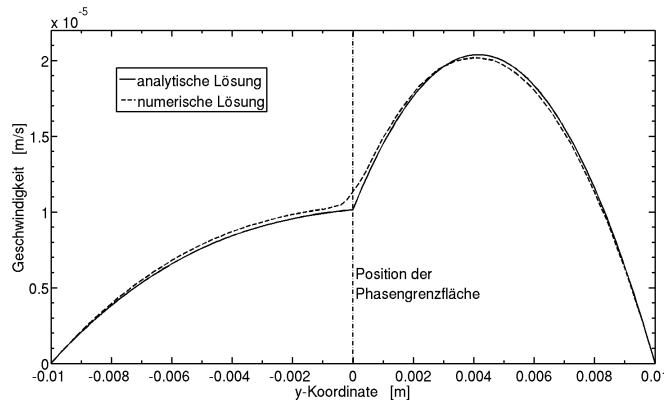


Abb. 7.3.: Geschwindigkeitsverteilung im Spalt. Dargestellt sind die analytische Lösung sowie die Lösung mit FS3D.

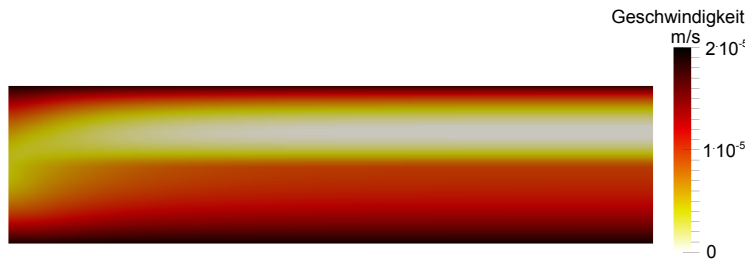


Abb. 7.4.: Geschwindigkeitsfeld der Spaltströmung. Die gesuchte Geschwindigkeitsverteilung ergibt sich in ausreichender Entfernung zum Einlass.

niedrige Kapillarzahlen und in Halpern und Gaver (1994) ^[43] für hohe Kapillarzahlen gegeben. Das 2D-Bretherton Problem wurde bereits für die Verifizierung von CFD-Codes verwendet ^[85].

Für scherverdünnende Rheologie kann die Grenzschichtdicke berechnet werden gemäß ^[42,50]

$$H_{\infty} = [K(n)R_C]^{\frac{3}{2n+1}} \left[\frac{\eta_{NN}U_B}{\sigma} \right]^{\frac{2}{2n+1}}, \quad K(n) = 2.553e^{-0.65n} \quad (7.4)$$

mit dem Blasenradius R_C und den Modellparametern η_{NN} und n des Power-Laws. Die Geometrie des Problems ist in Abbildung 7.5 dargestellt. Die Werte müssen dimensionsbehaftet mit Zentimeter-Gramm-Sekunde- (CGS)-Einheiten eingesetzt werden.

Die Simulation wird mit 512×64 Zellen durchgeführt, um den Film mit mindestens vier Zellen aufzulösen. Die Dichte der beiden Phasen beträgt 1000 kg/m^3 , die Viskosität der Gasblase beträgt $1 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$ und der Oberflächenspannungskoeffizient $1 \cdot 10^{-7} \text{ N/m}$. Die Viskosität der Flüssigkeit wird durch ein Power-Law mit $\eta_{NN} = 5 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$ und $n = 0.75$ beschrieben. Nach der analytischen Gleichung berechnet

sich die Grenzschichtdicke zu $5.63 \cdot 10^{-5}$ m; mit FS3D wird eine Grenzschichtdicke von $5.7 \cdot 10^{-5}$ m berechnet. Mit nur 1.3 % Abweichung ist der Vorhersage der Grenzschichtdicke sehr genau.

Auch die Geometrie der Grenzfläche kann analytisch für ein Bretherton Problem mit einer scherverdünnenden Flüssigkeit bestimmt werden^[50]. Abbildung 7.5 zeigt die Geometrie der Grenzfläche für $Ca_p = 0.05$ aus der Literatur^[50] sowie die Berechnung mittels FS3D. Die Übereinstimmung der analytischen Lösung und der Simulation mit FS3D ist gut, mit geringen Abweichungen im vorderen Bereich. Die nicht triviale Viskositätsverteilung der quasistationären Strömung ist in Abbildung 7.6 dargestellt.

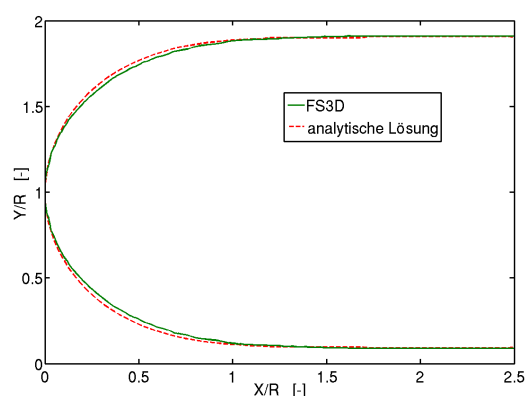


Abb. 7.5.: Geometrie der Phasengrenzfläche für das 2D-Bretherton Problem aus der Literatur^[50] und simuliert mit FS3D.

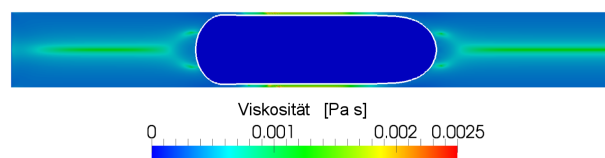


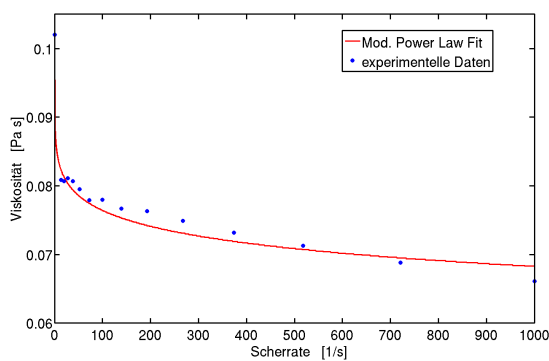
Abb. 7.6.: Viskositätsverteilung der Power-Law-Flüssigkeit für das 2D-Bretherton Problem.

Die angegebenen Testfälle stellen eine Verifizierung des FS3D-Codes für Zweiphasenströmungen mit scherverdünnender Viskosität dar.

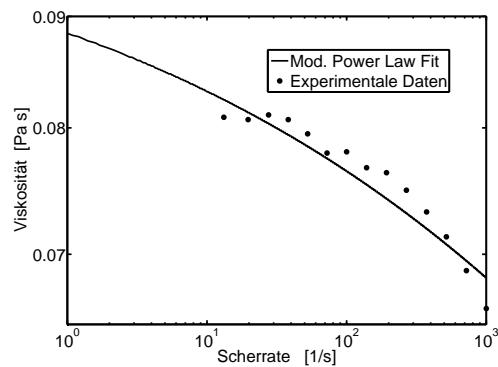
Validierung

Für die Validierung von FS3D für die Simulation der Kollision scherverdünnender Tropfen werden Versuchsergebnisse von binären Tropfenkollisionen von Motzigmab et al.^[69] herangezogen. Die scherverdünnende Flüssigkeit ist eine wässrige Lösung mit 2.8 Gew. % Carboxymethylcellulose (CMC)-Natriumsalz mit einer Dichte

von 1000 kg/m^3 und einem Oberflächenspannungskoeffizienten von $70 \cdot 10^{-3} \text{ N/m}$. CMC kann newtonsche, strukturviskose und viskoelastische Rheologie aufweisen. Lösungen mit Konzentrationen bis 0.2 Gew. % zeigen newtonsches Verhalten, zwischen 0.2 bis 3.0 Gew. % wird scherverdünnende Rheologie beobachtet, wobei dieser Effekt bei höheren Konzentrationen ansteigt. Oberhalb 3.0 Gew. % setzt viskoelastisches Verhalten ein^[39]. Bei der verwendeten CMC-Lösung mit einer Konzentration von 2.8 Gew. % muss scherverdünnendes Verhalten berücksichtigt werden, viskoelastische Rheologie ist nicht vorhanden. Die Viskosität in Abhängigkeit der Scherrate ist in Abbildung 7.7 dargestellt. Neben den experimentell gemessenen Datenpunkten aus^[69] wird ein Kurvenfitting mit dem modifizierten Power-Law (Gl. 7.2) dargestellt. Die Modellparameter sind $K = 6.7$ und $n = 0.83$, die Viskosität η_0 beträgt 0.102 Pa s .



(a) Lineare Darstellung der Viskosität



(b) Doppelt logarithmische Darstellung der Viskosität

Abb. 7.7.: Viskosität der scherverdünnenden Flüssigkeit in linearer und doppelt logarithmischer Darstellung: experimentelle Werte^[69] und das modifizierte Power-Law-Modell (Gl. 7.2, $K = 6.7$, $n = 0.83$).

Durchführung der Simulation

Die Simulationen wurden auf bis zu 32 Prozessoren mit einem kartesischen Gitter mit bis zu 34 Millionen Zellen durchgeführt. Die Kollision von zwei gleichgroßen Tropfen kann unter Verwendung von drei Symmetrieebenen simuliert werden, um den Rechenaufwand zu reduzieren, d.h. ein Vierteltropfen, der gegen eine Symmetrieebene prallt. Für die Simulation der Tropfenkollision aus Motzigemba et al.^[69] beträgt die Größe des Rechengebiets $1.4 \cdot 10^{-2} \times 1.4 \cdot 10^{-2} \times 7 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ mit einer Auflösung von $256 \times 256 \times 128$ Zellen. Die Anzahl von Gitterzellen in einer Richtung entspricht 2^N , um die Effizienz des geometrischen Mehrgitterlösers zu optimieren, der in FS3D für die Lösung der Poissonsgleichung eingesetzt wird. Das Setup ist in Tabelle A.6 zusammengefasst.

Der Tropfen wird als Flüssigkeitskugel mit homogener Geschwindigkeit in ruhender Luft initialisiert. Die Materialparameter von Luft sind die Dichte von 1.2 kg/m^3

und die Viskosität von $1.8 \cdot 10^{-5}$ Pa·s. Die Randbedingungen sind Slip-Bedingungen an den Symmetrieebenen mit der Lamellen-Stabilisierung in der Kollisionsebene. An allen anderen Rändern ist eine homogene Neumann-Randbedingung für die Geschwindigkeit zusammen mit Druck null eingestellt. Das Setup ist in Abbildung 7.8 dargestellt.

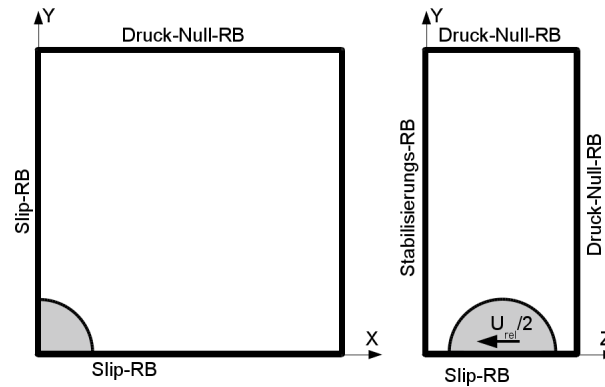


Abb. 7.8.: Setup einer binären Kollision von zwei gleichgroßen Tropfen unter Ausnutzung von Symmetrieebenen, um den Rechenaufwand zu reduzieren.

Der Drucksprung aufgrund von Oberflächenspannung wird mit dem konservativen Continuum Surface Stress (CSS)-Modell^[57] berechnet, für die Zeitdiskretisierung wird das explizite Euler-Verfahren verwendet. Die Zeitschrittweite wird mit dem in Kapitel 3.4 beschriebenen Verfahren bestimmt.

Auswertung

Der Vergleich der zeitlichen Entwicklung von DNS und experimentellen Ergebnissen^[69] ist in Abbildung 7.9 dargestellt. Geringe Abweichungen sind in der Vorhersage des maximalen Durchmessers zu beobachten. In der Expansionsphase ist die Übereinstimmung noch sehr gut, die Kontraktionsphase scheint im Experiment schneller als in der numerischen Simulation zu sein. Die Unsicherheiten in den experimentellen Messungen sind mit $\pm 10\%$ bezogen auf den anfänglichen Durchmesser D_0 angegeben^[69]. Daher wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt, in der die Auswirkungen einer eventuellen Durchmesserabweichung auf die Stoßkomplexdynamik untersucht werden. Es wurden Simulationen mit Anfangsdurchmessern von $\pm 10\%$ durchgeführt. Diese Variation des ursprünglichen Durchmessers führt zu Veränderungen des maximalen Stoßkomplexdurchmessers vom 0.8327 bis zum 1.1767-fachen des Referenzwertes. Abbildung 7.9 zeigt die Evolution des Stoßkomplexdurchmessers für die Variation des initialen Durchmessers. Der maximale Durchmesser der experimentellen Daten ist innerhalb dieses Bereiches.

Mehrere Tests wurden durchgeführt, um mögliche Quellen für numerische Fehler zu beseitigen. Die Gitterabhängigkeit des maximalen Durchmessers und des Geschwindigkeitsfeldes wurde untersucht. Eine Simulation mit der Auflösung von 160

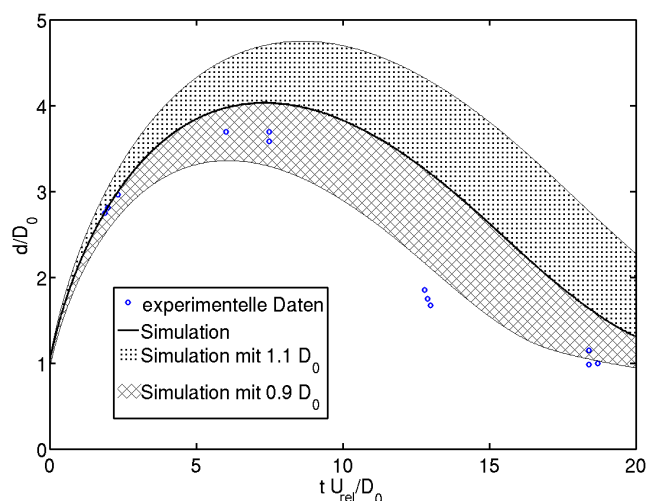


Abb. 7.9.: Evolution des Durchmessers des Stoßkomplexes als Funktion der Zeit für eine wässrige CMC-Lösung. Dargestellt sind experimentelle Daten und Simulationen. Zusätzlich sind Simulationsergebnisse für eine Variation des initialen Durchmessers gezeigt, die obere Kurve resultiert aus einem größeren und die untere Kurve aus einem kleineren initialen Durchmesser.

Zellen pro initialen Durchmesser (entspricht insgesamt 67 Millionen Zellen) wurde als Referenz-Fall gewählt, eine Auflistung der durchgeführten Simulationen ist in Tabelle 7.1 dargestellt.

| Zellen pro D_0 | $[D_{\max}/D_0]$ | Abweichungen von D/D_0 zum Referenzfall | Abweichung von E_{kin} zum Referenzfall |
|------------------|------------------|---|--|
| 50 | 4.33 | 8.12 | 5.75 |
| 60 | 4.07 | 1.76 | 2.53 |
| 80 | 4.04 | 0.89 | 1.81 |
| 93* | 4.03 | 0.69 | 1.13 |
| 100 | 4.03 | 0.59 | 1.12 |
| 160** | 4.00 | - | - |

*In nachfolgenden Simulationen wird der 93 Zellen/ D_0 -Fall genutzt.

**Referenzfall in der Gitterabhängigkeitsstudie

Tabelle 7.1.: Ergebnisse der Gitterabhängigkeitsstudie.

Um nicht nur die Geometrie des Stoßkomplexes, sondern auch das Geschwindigkeitsfeld in die Analyse mit einzubeziehen, wird neben dem Durchmesser auch die kinetische Energie mit dem Referenzfall verglichen. Tabelle 7.1 zeigt, dass die Abweichungen des Durchmessers und der kinetischen Energie mit zunehmender Auflösung

geringer werden. Um die kinetische Energie E_{kin} des Tropfens vergleichen zu können, wird die L^1 -Norm der Abweichung zum Referenzfall berechnet, d.h.

$$\frac{\int_0^T |E_{\text{kin}} - E_{\text{kin}}^{\text{ref}}| dt}{\int_0^T |E_{\text{kin}}^{\text{ref}}| dt}. \quad (7.5)$$

Ein Vergleich der Ergebnisse bei Auflösungen mit 50 Zellen beziehungsweise 100 Zellen pro initialem Tropfendurchmesser ergibt sich eine Fehlerabnahme zweiter Ordnung. In den folgenden Simulationen wird eine Auflösung von 93 Zellen/ D_0 als Standardauflösung eingesetzt.

7.3 Ergebnisse: Zentrale Tropfenkollisionen

Direkte Numerische Simulationen erlauben die Analyse von Strömungsvorgängen im Inneren von kollidierenden Tropfen. In Abbildung 7.10 sind die Simulationsergebnisse einer zentralen Kollision dargestellt. Ein Vierteltropfen der scherverdünnenden Flüssigkeit bewegt sich nach links in Richtung Ursprung und kollidiert mit seinem Spiegelbild, das in der Simulation durch eine Symmetrieebene an dem linken Rechengebietsrand realisiert wurde. Alle Zellen mit einem Volumenanteil von $f \geq 0.5$ werden angezeigt. Das linke Bild zeigt die Scherrate, deren Maximalwert ringförmig etwa mittig zwischen Rand und Mittelpunkt des Stoßkomplexes auftritt. Die Scherrate beträgt zwischen 10^4 und 10^6 1/s. Im rechten Teil von Abb. 7.10 ist das Geschwindigkeitsfeld in der Symmetrieebene dargestellt. In den äußeren Teilen des Stoßkomplexes verläuft die Strömung parallel zur Symmetrieebene. Weiter entfernt von der Symmetrieebene ist die Strömung in Richtung Prallebene ausgerichtet. Die maximale Scherrate tritt an der Stelle auf, wo die Strömung umgelenkt und nach außen beschleunigt wird. Die Viskosität beträgt zwischen 40 und 59 mPa s.

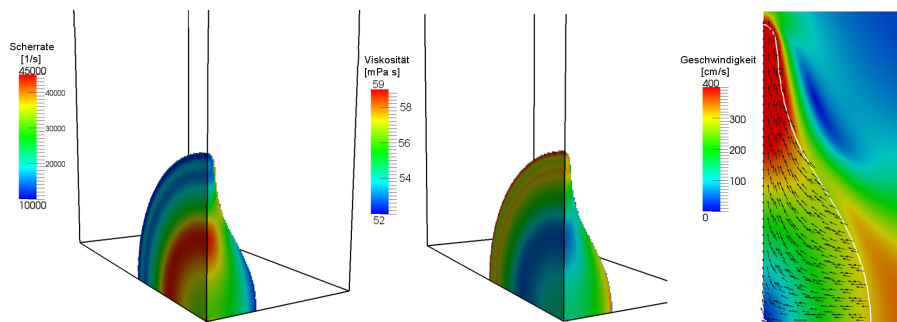


Abb. 7.10.: Ein Vierteltropfen einer scherverdünnenden Flüssigkeit bewegt sich nach links und kollidiert mit seinem Spiegelbild. Die Scherrate, das Viskositäts- und das Geschwindigkeitsfeld während der initialen Phase der Kollision sind bei $t^* = t \frac{U_{\text{rel}}}{D_0} = 0.83$ dargestellt.

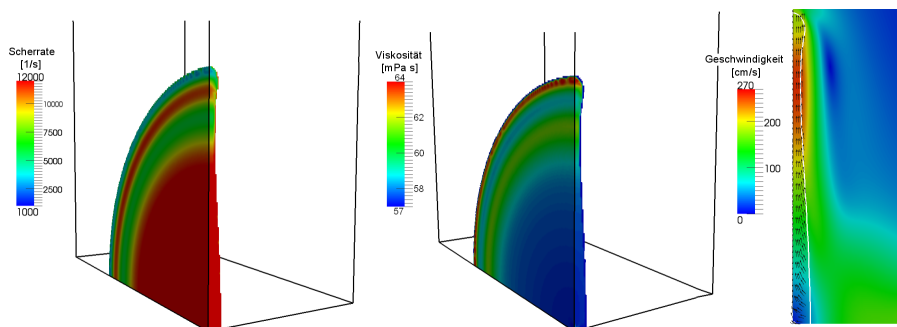


Abb. 7.11.: Kollisionskomplex während der Expansionsphase, $t^* = 3,81$.

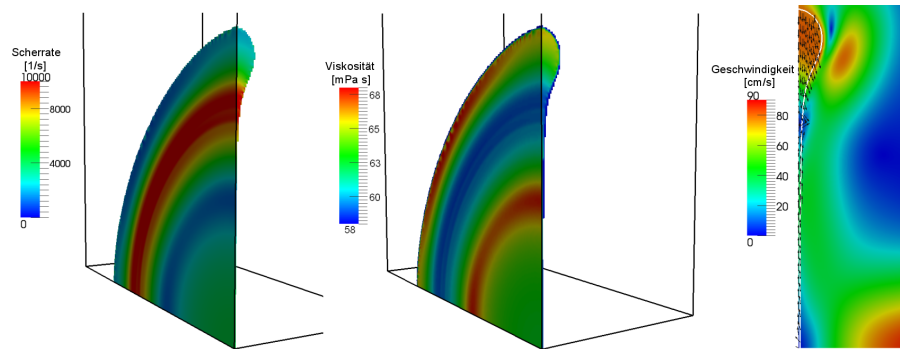


Abb. 7.12.: Kollisionskomplex während der Kontraktionsphase, $t^* = 11.25$.

Abbildung 7.11 zeigt den Kollisionskomplex bei $t^* = 3.8$. Zu diesem Zeitpunkt befindet sich der Tropfen in der Expansionsphase, d.h. die maximale Ausdehnung ist noch nicht erreicht. Der linke Teil von Abb. 7.11 zeigt zwei Scherratenmaxima, im mittleren Teil des Kollisionskomplexes sowie am Übergangsbereich zwischen Lamelle und Rand. Das Geschwindigkeitsfeld (rechts in der Abbildung) zeigt den Grund für die zwei Maxima. Das innere Maximum ist das Resultat der Strömungsumlenkung. Die hohen Scherraten im Außenbereich treten auf, weil Fluid aus der Lamelle austritt, umgelenkt und abgebremst wird, während es in den Rand strömt. Insgesamt balancieren sich zwischen Rand und Lamelle der Impuls der nach außen strömenden Lamellenflüssigkeit, die Trägheit der Flüssigkeit im Rand und die zum Zentrum gerichtete Oberflächenspannungskraft^[108]. Die Viskosität beträgt zwischen 57 und 64 mPa s.

Scherrate, Viskosität und Geschwindigkeit in der Kontraktionsphase des Kollisionskomplexes sind in Abbildung 7.12 dargestellt. Die maximale Scherrate befindet sich zwischen Lamelle und Rand. Der Grund für die hohe Scherrate in diesem Bereich ist die Prallströmung zwischen Lamellenflüssigkeit und Rand. Das Fluid in der Lamelle strömt weiterhin nach außen, während sich der Rand in Richtung Ursprung bewegt. Die Viskosität beträgt in der Kontraktionsphase zwischen 58 und 68 mPa s.

Konzept der effektiven Viskosität

In diesem Abschnitt wird die Fragestellung untersucht, ob eine nichtnewtonsche Tropfenkollision mit einer newtonschen effektiven Viskosität modelliert werden kann. Zu diesem Zweck wird eine newtonsche Viskosität gesucht, die zu dem gleichen Maximaldurchmesser wie die Kollision scherverdünnender Tropfen führt. Eine solche effektive Viskosität kann durch Simulationen von Kollisionen unter Variation der Viskosität und anschließender Interpolation gefunden werden. In Tabelle 7.2 sind die Maximaldurchmesser für unterschiedliche newtonsche Viskositäten aufgelistet.

Abb. 7.13 zeigt die Evolution des Durchmessers des Kollisionskomplexes mit den newtonschen Flüssigkeiten. Der Maximaldurchmesser im Fall der scherverdünnenden

| η | D_{\max}/D_0 |
|-----------|----------------|
| 45 mPa s | 4.29 |
| 60 mPa s | 3,80 |
| 75 mPa s | 3,39 |
| 102 mPa s | 2,85 |

Tabelle 7.2.: Maximaldurchmesser in Abhängigkeit von der Viskosität.

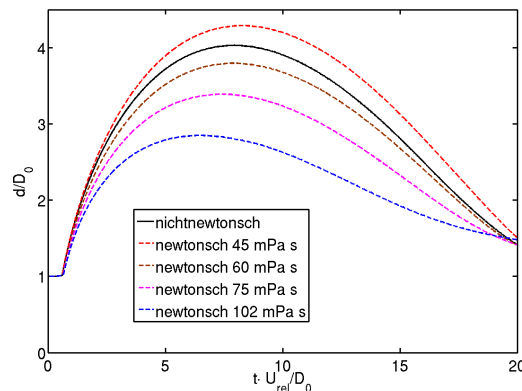


Abb. 7.13.: Evolution des Stoßkomplexdurchmessers der Kollision newtonscher Tropfen unter Variation der Viskosität sowie die Evolution des scherverdünnenden Tropfens.

den Tropfen liegt bei $4.03 D_{\max}/D_0$. Durch lineare Interpolation der Werte aus Tab. 7.2 ergibt sich dieser Maximaldurchmesser für die Kollision newtonscher Tropfen mit einer Viskosität von 54 mPa s. Das Setup ist in Tabelle A.7 zusammengefasst. Die Simulation mit dieser Viskosität zeigt, dass mit $3,98 D_{\max}/D_0$ der Maximaldurchmesser des scherverdünnenden Falls mit 1 % Genauigkeit erreicht wird. Die Evolution des Stoßkomplexdurchmessers für die Kollision scherverdünnender Tropfen und newtonscher Tropfen mit der effektiven Viskosität ist in Abb. 7.14 gezeigt.

Das Ergebnis ist, dass die volle zeitliche Entwicklung fast identisch ist. Das Gleiche gilt für die Geometrie des Stoßkomplexes, dargestellt in Abb. 7.15. Lediglich in der minimalen Dicke der Lamelle kann ein geringfügiger Unterschied festgestellt werden. In dem newtonschen Fall beträgt die Dicke der Lamelle $4.8 \mu\text{m}$, in dem nichtnewtonschen Fall beträgt sie $5.6 \mu\text{m}$. Ein Vergleich der Geschwindigkeitsfelder zeigt keinen signifikanten Unterschied. Offensichtlich ist es möglich, die Dynamik einer Kollision scherverdünnender Tropfen mit der gefundenen effektiven Viskosität wiederzugeben. Im Folgenden wird analysiert, welche Ursache zur Ähnlichkeit in der Kollisionsdynamik führt.

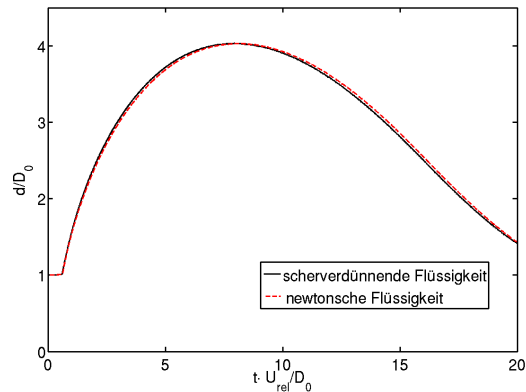


Abb. 7.14.: Evolution des Maximaldurchmessers der Kollision scherverdünnender Tropfen sowie newtonscher Tropfen mit effektiver Viskosität.

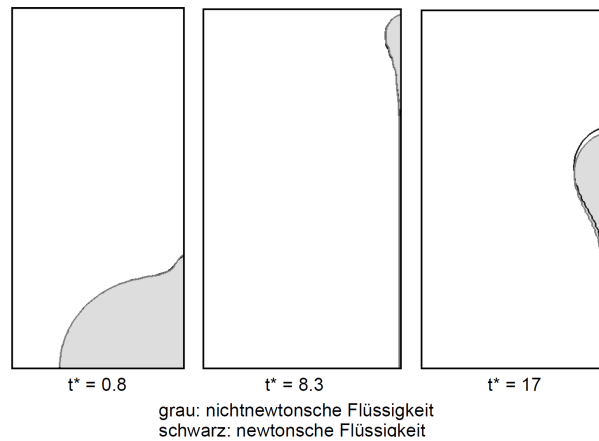


Abb. 7.15.: Geometrie des Stoßkomplexes mit scherverdünnender bzw. newtonscher Rheologie.

Viskosität

Abbildung 7.16 zeigt die zeitliche Entwicklung der maximalen, minimalen und mittleren Viskosität bei der Kollision scherverdünnender Tropfen, zusätzlich ist noch die effektive Viskosität eingetragen. Die scherverdünnende Viskosität wird am Anfang deutlich reduziert, wenn der Tropfen mit seinem Spiegelbild kollidiert. Während der Expansion des Stoßkomplexes steigt die Viskosität an und sinkt anschließend erneut ab aufgrund der Kontraktion des Stoßkomplexes. Die mittlere Viskosität hat zu Beginn den gleichen Wert wie die effektive Viskosität.

Energie

Die effektive Viskosität entspricht dem Minimum der mittleren Viskosität, da ein relativ kleiner Bereich mit hohen Scherraten und die daraus folgende reduzierte Vis-

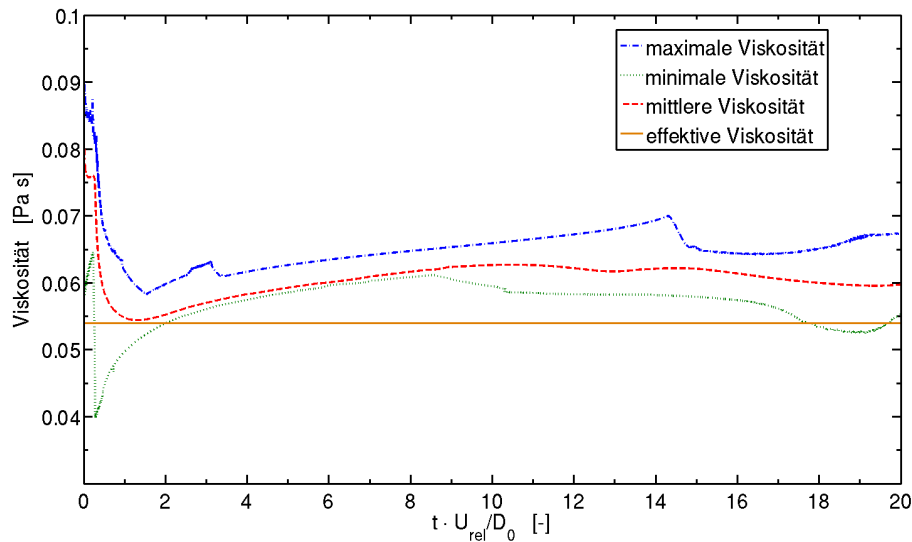
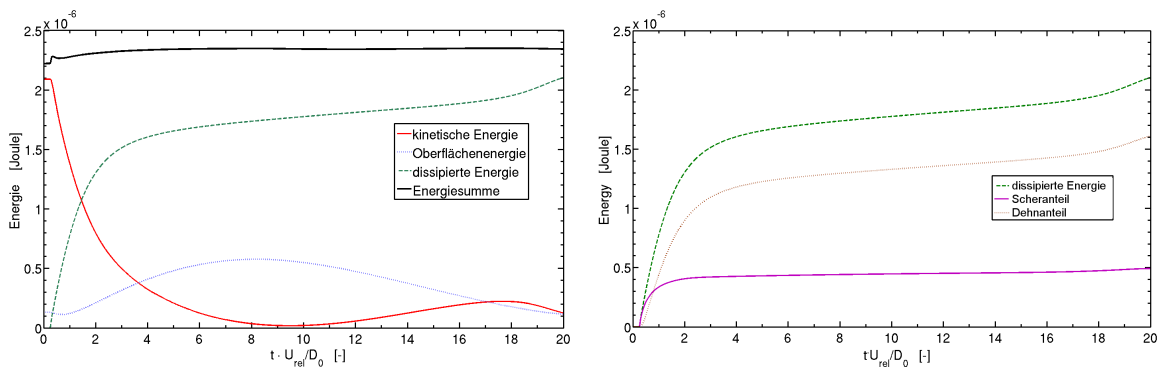


Abb. 7.16.: Maximale, minimale und mittlere Viskosität des Kollisionskomplexes als Funktion der Zeit.

kosität zu Beginn der Kollision offenbar wichtiger sind als die mittlere Viskosität während der gesamten Dauer des Zusammenstoßes. Um den Grund für dieses Phänomen zu verstehen, werden im Folgenden die einzelnen Energieanteile ausgewertet. Dies sind die mechanischen Energieanteile kinetische Energie und Oberflächenenergie sowie die irreversibel in Wärme umgewandelte (dissipierte) Energie.



(a) Verlauf aller Energieanteile.

(b) Dehn- und Scheranteil der dissipierten Energie.

Abb. 7.17.: Verlauf verschiedener Energieanteile als Funktion der Zeit bei einer zentralen Tropfenkollision.

Abbildung 7.17(a) zeigt die Entwicklung der verschiedenen Energieanteile während der Kollision scherverdünnender Tropfen. Die durchgezogene Linie beschreibt den Verlauf der kinetischen Energie, die nach dem initialen Kontakt absinkt, bis der Stoßkomplex seinen maximalen Durchmesser erreicht und fast die gesamte kinetische Energie in andere Energieanteile umgewandelt wurde. Anschließend kontrahiert der Stoßkomplex, der Anteil der kinetischen Energie steigt wieder an. Die ge-

punktete Linie beschreibt den Verlauf der Oberflächenenergie, die mit Erreichen des maximalen Durchmessers auch ein Maximum erreicht. Die viskos dissipierte Energie steigt in der initialen Phase der Kollision sprunghaft an und ist anschließend nahezu konstant. Abbildung 7.17(b) zeigt eine Zerlegung der dissipierten Energie in einen Dehnanteil und einen Scheranteil. Der Dehnanteil besteht aus den ersten drei Termen in Gl. 7.1, der Scheranteil besteht aus den letzten drei Termen. Der Scheranteil ist nur im ersten Moment der Kollision relevant; der Dehnanteil wird zu einem späteren Zeitpunkt signifikant.

Dies erklärt den Einfluss der nichtnewtonschen Viskosität: Während der Kollision führt die viskose Reibung zu Dissipation durch Scherung aufgrund der Strömungsumlenkung von der ursprünglichen Flugrichtung der Tropfen zu einer radial nach außen gerichteten Strömung. Anschließend steigt der Dehnanteil der Dissipation aufgrund der Strömung in der Lamelle, der Scheranteil nimmt ab. In späteren Stadien der Kollision dominieren Oberflächen- und Trägheitskräfte die Kollisionsdynamik.

Um zu untersuchen, ob die Viskosität ausschließlich zu Beginn einen signifikanten Einfluss auf die Entwicklung einer Tropfenkollision hat, wurden numerische Experimente durchgeführt. Zu diesem Zweck sind Kollisionen newtonscher Tropfen unter Variation der Viskosität simuliert worden. In Tabelle 7.3 sind die durchgeführten Experimente aufgelistet. Die zeitliche Entwicklung des Durchmessers ist in Abb. 7.18 dargestellt.

| Viskosität | Abweichung vom Referenzfall |
|---|-----------------------------|
| 108 mPa s | 22% |
| 27 mPa s | 32% |
| 54 mPa s zu Beginn, 108 mPa s für $t^* > 3,6$ | 5% |
| 54 mPa s zu Beginn, 27 mPa s für $t^* > 3,6$ | 6% |

Tabelle 7.3.: Übersicht über die numerischen Experimente.

Die durchgezogenen Linien sind das Resultat von Simulationen mit konstanter Viskosität während der gesamten Kollision, wobei der doppelte bzw. halbe Wert der effektiven Viskosität eingestellt wurde. Die maximale Abweichung des Durchmessers des Kollisionskomplexes zum Referenzfall mit der effektiven Viskosität beträgt bei 108 mPa s 22 %; bei 27 mPa s wird eine Differenz von 32 % beobachtet. Dies zeigt den signifikanten Einfluss der Viskosität auf die Kollisionsdynamik. Die gestrichelten Linien zeigen die zeitliche Entwicklung des Durchmessers des Kollisionskomplexes, die mit einer Viskosität von 54 mPa s startet und dann abrupt bei $t^* = 3,6$ verdoppelt beziehungsweise halbiert wird. Der maximale Durchmesser hat bei 27 mPa s für $t^* > 3,6$ eine Differenz von 6 %, bei 108 mPa s eine Differenz von 5 %. Dies zeigt, dass die Viskosität in späten Stadien der Kollision einen geringen Einfluss auf die Kollisionsdynamik hat.

Dies führt zu dem Schluss, dass eine Kollision scherverdünnender Flüssigkeitstropfen durch eine Kollision von Tropfen newtonscher Viskosität modelliert werden kann,

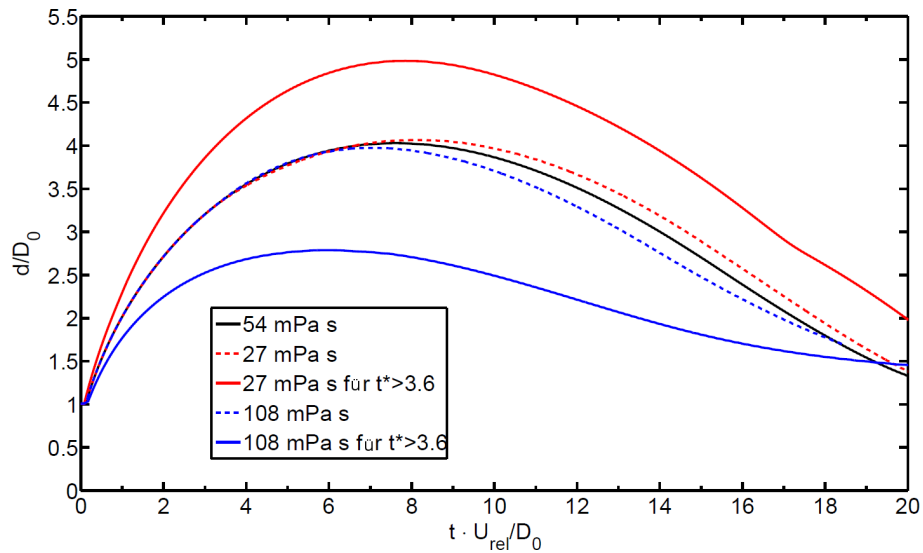


Abb. 7.18.: Evolution des Stoßkomplexes für unterschiedliche Viskositäten. Mittlere durchgezogene Linie: Referenzfall mit der effektiven Viskosität, durchgezogene Linien außen: konstante Viskosität, gestrichelte Linien: bis $t^* = 3,6$ effektive Viskosität, anschließend halbe bzw. doppelte Viskosität.

wenn eine effektive newtonsche Viskosität gefunden werden kann. In dem speziellen Fall der hier betrachteten Kollision wurde der Wert von 54 mPa s durch Simulationen mit 60 mPa s und 45 mPa s mit anschließender linearer Interpolation des maximalen Durchmessers gefunden.

7.4 Ergebnisse: Dezentrale Tropfenkollisionen

Die Gültigkeit des in Kapitel 7.3 vorgestellten Konzeptes der effektiven Viskosität soll für dezentrale Kollisionen geprüft und untersucht werden.

Setup

Die Materialparameter, Tropfengröße und relative Geschwindigkeit sind die gleichen wie in Kapitel 7.3, nur der Versatz der kollidierenden Tropfen wird geändert. Der Kollisionsparameter X reicht von 0.25 über 0.5 bis 0.75 und für jeden Kollisionsparameter werden zwei Simulationen durchgeführt, eine mit scherverdünnendem und eine mit newtonschem Fließverhalten. Im newtonschen Fall wird die effektive Viskosität, die für die zentrale Kollision gefunden wurde, als Viskosität gewählt. Der Kollisionsparameter X (auch als Versatz bezeichnet) ist definiert als der Abstand der beiden Tropfenzentren senkrecht zur Relativgeschwindigkeit bezogen auf den Tropfendurchmesser.

Die Simulationen werden auf bis zu 32 Intel XEON Linux-Cluster-Kernen mit 4 GB Hauptspeicher pro Kern auf Rechengittern mit bis zu 67 Millionen Zellen durchgeführt. In den Simulationen wird die Stabilisierung für den Fall einer asymmetrischen Kollision (Kap. 4.3) genutzt. Aufgrund der Symmetrie einer dezentralen Tropfenkollision wird eine Symmetrieebene in den Simulationen verwendet, um den Rechenaufwand zu reduzieren. An den anderen Rändern des Rechengebiets wird eine homogene Neumann-Randbedingung für die Geschwindigkeit zusammen mit konstantem Druck eingesetzt (atmosphärische Randbedingung). Das Rechengebiet wird so gewählt, dass genügend Platz für die relevanten Phasen der Kollision vorhanden ist. Aufgrund der extrem langen Ligamente, die gegen Ende der Kollisionen entstehen, würde eine Anpassung der Rechengebietsgröße zu einem unverhältnismäßig großen Rechenaufwand führen. Da die Simulation der Separation nicht erforderlich ist, wird die Simulation beendet, sobald Flüssigkeit den Rand des Rechengebiets erreicht. Domaingröße und Auflösung sind in Tabelle 7.4 aufgeführt. Eine Übersicht über den Setup ist in den Tabellen A.8, A.9 und A.10 aufgelistet.

Einfluss der Stabilisierung

Vor der Beschreibung der Kollisionsdynamik muss der Einfluss des Stabilisierungsalgorithmus auf die Massenbilanz analysiert werden. Die Bildung einer dünnen Flüssigkeitslamelle wird in allen Fällen beobachtet, folglich muss die Addition von Masse überwacht werden. Die durch den Algorithmus zur Stabilisierung hinzugefügte

| Rheologie, Versatz - | Auflösung [Zellen/ D_0] , [Zellen] | Domaingröße [x/D_0] | Massenzuwachs [%] |
|-------------------------|--|-----------------------------|-----------------------|
| scherverd. , 0.25 | 70, $512 \times 512 \times 256$ | $7.3 \times 7.3 \times 3.7$ | 2.17 |
| newtonsch, 0.25 | 70, $512 \times 512 \times 256$ | $7.3 \times 7.3 \times 3.7$ | 3.14 |
| scherverd. , 0.5 | 47, $512 \times 512 \times 64$ | $11 \times 11 \times 1.4$ | 2.43 |
| newtonsch, 0.5 | 47, $512 \times 512 \times 64$ | $11 \times 11 \times 1.4$ | 2.81 |
| scherverd. , 0.75 | 56, $512 \times 512 \times 128$ | $9.2 \times 9.2 \times 2.3$ | 3.51×10^{-5} |
| newtonsch, 0.75 | 56, $512 \times 512 \times 128$ | $9.2 \times 9.2 \times 2.3$ | 1.97×10^{-5} |

Tabelle 7.4.: Übersicht über die Simulationen.

Masse ist in Tabelle 7.4 aufgeführt. Ein kleiner Versatz führt zu einem stärkeren Massenzuwachs, da der Durchmesser der Lamelle größer ist und sie länger existiert. Darüber hinaus hängt die Menge addierter Masse von der Viskosität ab, da die physikalische Dicke einer Lamelle im Fall von scherverdünnender Flüssigkeit größer ist im Vergleich zu einer newtonschen Flüssigkeit. Dies wird auch für zentrale Kollisionen beobachtet, siehe Kap. 7.3. Eine Ausnahme bildet der Fall mit $X = 0.75$, bei dem sehr wenig Flüssigkeit hinzugefügt wird. Daher erreicht die Lamelle des newtonschen Tropfes die Grenze von zwei Zellen schneller, sodass der Algorithmus früher Flüssigkeit hinzufügen muss. Der Algorithmus addiert Flüssigkeit, bis die beiden Zellen gefüllt sind; da Flüssigkeit von der Lamelle in Richtung Rand strömt, muss der Algorithmus Flüssigkeit hinzuzufügen, solange die Lamelle existiert.

Geometrie des Kollisionskomplexes

Die maximale Ausdehnung des Kollisionskomplexes vom ersten Kontakt bis zum Erreichen der Grenze des Rechengebiets unter Variation des Versatzes und für beide Rheologien ist in Abbildung 7.19 dargestellt. Die Entwicklung des Kollisionskomplexes im scherverdünnenden Fall und im newtonschen Fall ist annähernd gleich. Die Größe des Kollisionskomplexes beträgt bei Kontakt der Tropfen $2 D_0$ und sinkt zunächst, weil die äußeren Enden, die am Anfang für die maximale Größe des Kollisionskomplexes bestimmend sind, die ursprüngliche Geschwindigkeit der kollidierenden Tropfen beibehalten. Anschließend nimmt die Größe zu, da sich die Flüssigkeit radial ausbreitet und gleichzeitig in Richtung von U_{rel} gedehnt wird. Die unterschiedlichen Kurven können wie folgt erklärt werden: Im Fall von $X = 0.25$ wird die Flüssigkeit abgebremst durch die Umwandlung von kinetischer Energie in Oberflächenenergie und durch viskose Dissipation. Im Fall von $X = 0.5$ ist der Verlust an kinetischer Energie reduziert und der Kollisionskomplex dehnt sich mit einer konstanten Geschwindigkeit von $0.63 U_{\text{rel}}$ aus. Bei $X = 0.75$ interagiert nur eine kleine Menge der Tropfen, während der Rest der Tropfen seine ursprüngliche Geschwindigkeit behält. Die Enden des Kollisionskomplexes bewegen sich mit $0.85 U_{\text{rel}}$ voneinander weg. Die Steigung der Kurve ist fast konstant, da die äußeren Enden des

Kollisionskomplexes nur durch ein dünnes Ligament verbunden sind, welches keinen Einfluss auf die Geschwindigkeit hat.

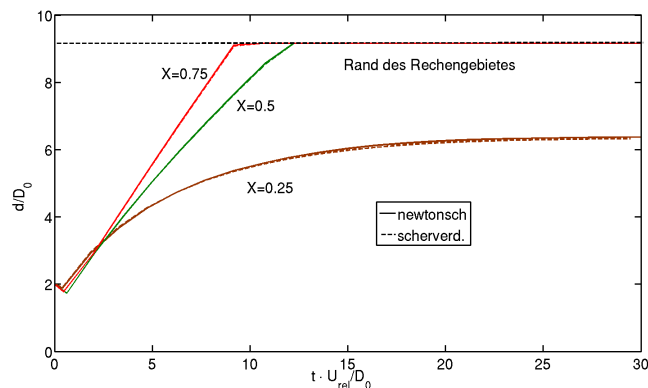


Abb. 7.19.: Maximaler Durchmesser des Kollisionskomplexes für unterschiedlichen Versatz.

Abbildung 7.20 zeigt die Entwicklung der Geometrie des Kollisionskomplexes. Alle Kollisionen zeigen temporär die Bildung einer Lamelle. Um die Eigenschaften der Lamelle quantitativ zu untersuchen, wird eine Lamelle als eine Struktur in der Mitte eines Kollisionskomplexes definiert, die dünner ist, als der Rand. Es wird beobachtet, dass die maximale Lamellenlebensdauer mit zunehmendem Versatz sinkt. Die Lebensdauer der Lamelle beträgt bei einem Versatz von 0.25 $t^* = 10.6$, bei 0.5 beträgt $t^* = 4.53$ und bei 0.75 beträgt $t^* = 2.72$. Die Zeit wird mit $t^* = D_0 / U_{rel}$ angegeben. Außerdem wird eine größere Oberfläche mit abnehmendem Versatz beobachtet, bei $X=0.25$ beträgt das Oberflächenverhältnis A/A_0 4.06, bei $X = 0.75$ beträgt A/A_0 1.59.

In allen betrachteten Fällen sammelt sich der Großteil der Flüssigkeit in Richtung der initialen Geschwindigkeit. Die Trägheit streckt die Lamelle in Richtung von U_{rel} . Gleichzeitig bewirkt die Oberflächenspannung eine Verringerung der Breite des Stoßkomplexes. Die Geschwindigkeit der Seitenränder ist am Ende der Kontraktion so hoch, dass bei $X = 0.25$ ein Blaseneinschluss im Stoßkomplex beobachtet wird. Dieses Auftreten von Blasen ist nicht zu verwechseln mit den Blasen, die während des ersten Kontakts von Tropfen entstehen, siehe Kapitel 6.2 sowie Nikolopoulos et al. (2009) ^[75].

Bevor der Stoßkomplex zerfällt, bilden sich in allen betrachteten Fällen Ligamente zwischen zwei Tropfen. Das Ligament zwischen den Tropfen wird im weiteren Verlauf dünner, da Flüssigkeit aus dem Ligament in die Tropfen strömt. Für den endgültigen Zerfall des Ligaments kommen zwei Mechanismen infrage. Der Abschnürungsmechanismus (engl. pinching mechanism) tritt auf, wenn das Verhältnis der Trägheit der Flüssigkeit im Stoßkomplexende zur Oberflächenspannungskraft größer als eins ist ^[74]. Die zweite Möglichkeit ist die Rayleigh-Plateau-Instabilität. Bei Pinching sind

Einschnürungen klar erkennbar, während bei dem Zerfall aufgrund von Instabilität Kapillarwellen zu beobachten sind, bevor der Zerfall einsetzt^[88]. In allen betrachteten Fällen sind Kapillarwellen auf dem Ligament zu beobachten, bevor es in Tropfen verschiedener Größe zerfällt. Folglich ist die Rayleigh-Plateau-Instabilität Ursache des Zerfalls.

Bei dem Kollisionsprozess können drei wesentliche Phasen identifiziert werden. Die erste Phase tritt kurz nach dem initialen Kontakt auf, sobald die Oberfläche des Kollisionskomplexes ein Minimum erreicht. Die zweite Phase setzt ein, wenn die maximale Oberfläche des Kollisionskomplexes erreicht ist. Die letzte eindeutig identifizierbare Phase der Kollision setzt ein, wenn die Geometrie des Stoßkomplexes als zwei durch ein Ligament verbundene Tropfen beschrieben werden kann. Diese Beschreibung der Evolution des Kollisionskomplexes ist gültig für scherverdünnende und auch für newtonsche Rheologie, da die Geometrie fast identisch ist.

Analyse der Kollisionsströmung: Initiale Phase

Die obere Reihe in Abbildung 7.21 zeigt die Scherratenverteilung im kollidierenden Tropfen. Die maximale Scherrate tritt bei $X=0.75$ auf, während im Fall $X=0.25$ die niedrigste maximale Scherrate zu beobachten ist. Die Verteilung der Scherrate ist im Fall $X=0.25$ vergleichsweise homogen. Die Viskositätsfelder in der zweiten Reihe zeigen, dass im Fall $X=0.75$ in großen Teilen des Tropfenvolumens hohe Viskositätswerte auftreten. Die dritte Reihe von Abb. 7.21 zeigt die lokale Dissipationsrate. Bei der Kollision mit einem Versatz von $X=0.25$ wird insgesamt mehr Energie dissipiert, im Fall von $X=0.75$ ist der Maximalwert der Dissipationsrate größer.

Dieses Verhalten kann als Folge von drei Eigenschaften der Dynamik von Kollisionen mit Versatz erklärt werden:

1. Durchdringungsvolumen

Ein translatierender Tropfen bildet ein durchströmtes Volumen von zylindrischer Form. Das Durchdringungsvolumen von zwei Tropfen wird folglich von der Schnittmenge dieses Zylinders mit einem zweiten Tropfen gebildet. Somit beschreibt das Durchdringungsvolumen die Menge der Flüssigkeitsteilchen, die interagieren, da sich ihre Trajektorien schneiden. Das auf das Volumen des Kollisionskomplexes bezogene Durchdringungsverhältnis beträgt

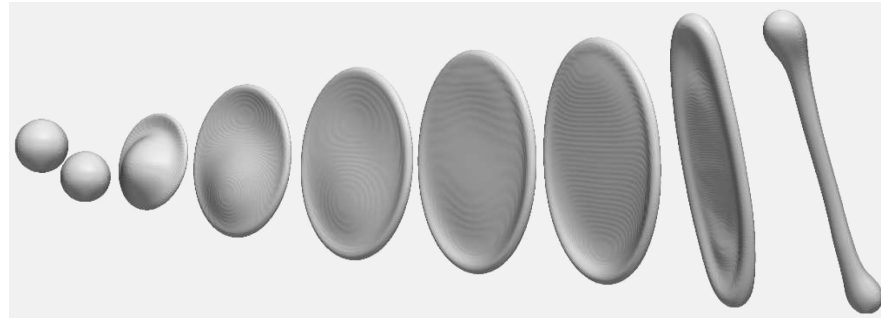
0.377 bei $X=0.25$,

0.202 bei $X=0.5$ und

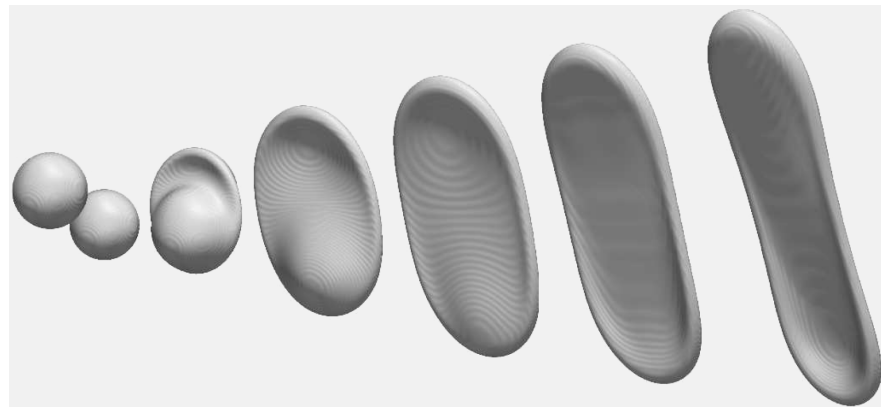
0.059 bei $X=0.75$.

2. Zeitskala der Impulsdiffusion

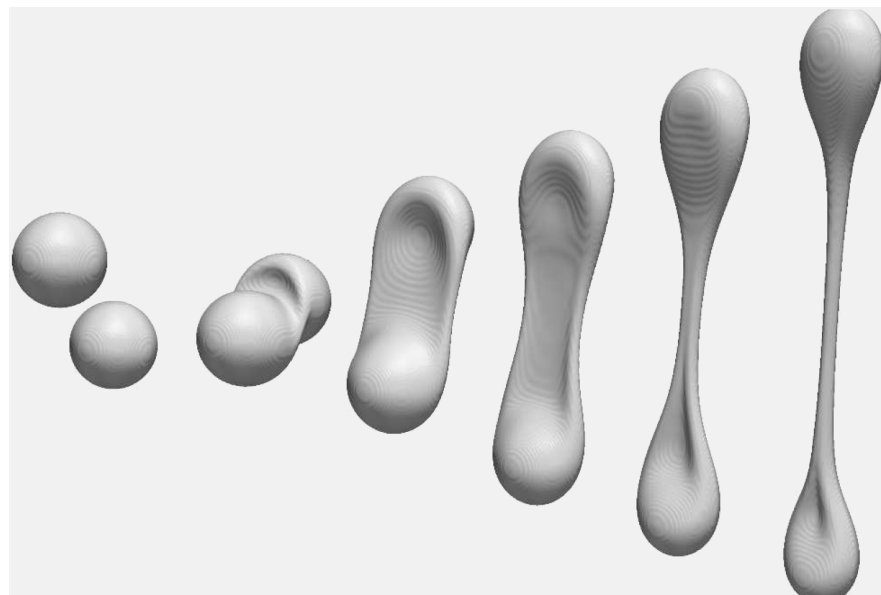
Viskose Dissipation kann außerhalb des Durchdringungsvolumens in den Teilen der Tropfen auftreten, die aufgrund von Impulsdiffusion erreicht werden



(a) Kollisionskomplex mit einem Versatz von 0.25 bei $t^*=0.0, 1.45, 2.9, 4.4, 5.8, 7.3, 13$ und 22 .



(b) Kollisionskomplex mit einem Versatz von 0.5 bei $t^*=0.0, 1.45, 2.9, 4.4, 5.8$ und 7.3 .



(c) Kollisionskomplex mit einem Versatz von 0.75 bei $t^*=0.0, 1.45, 2.9, 4.4, 5.8$ und 7.3 .

Abb. 7.20.: Geometrie des Kollisionskomplexes mit unterschiedlichem Versatz. Die Muster auf der Oberfläche sind auf die Rekonstruktion der Oberfläche mit Isoflächen durch die Visualisierungs-Software zurückzuführen.

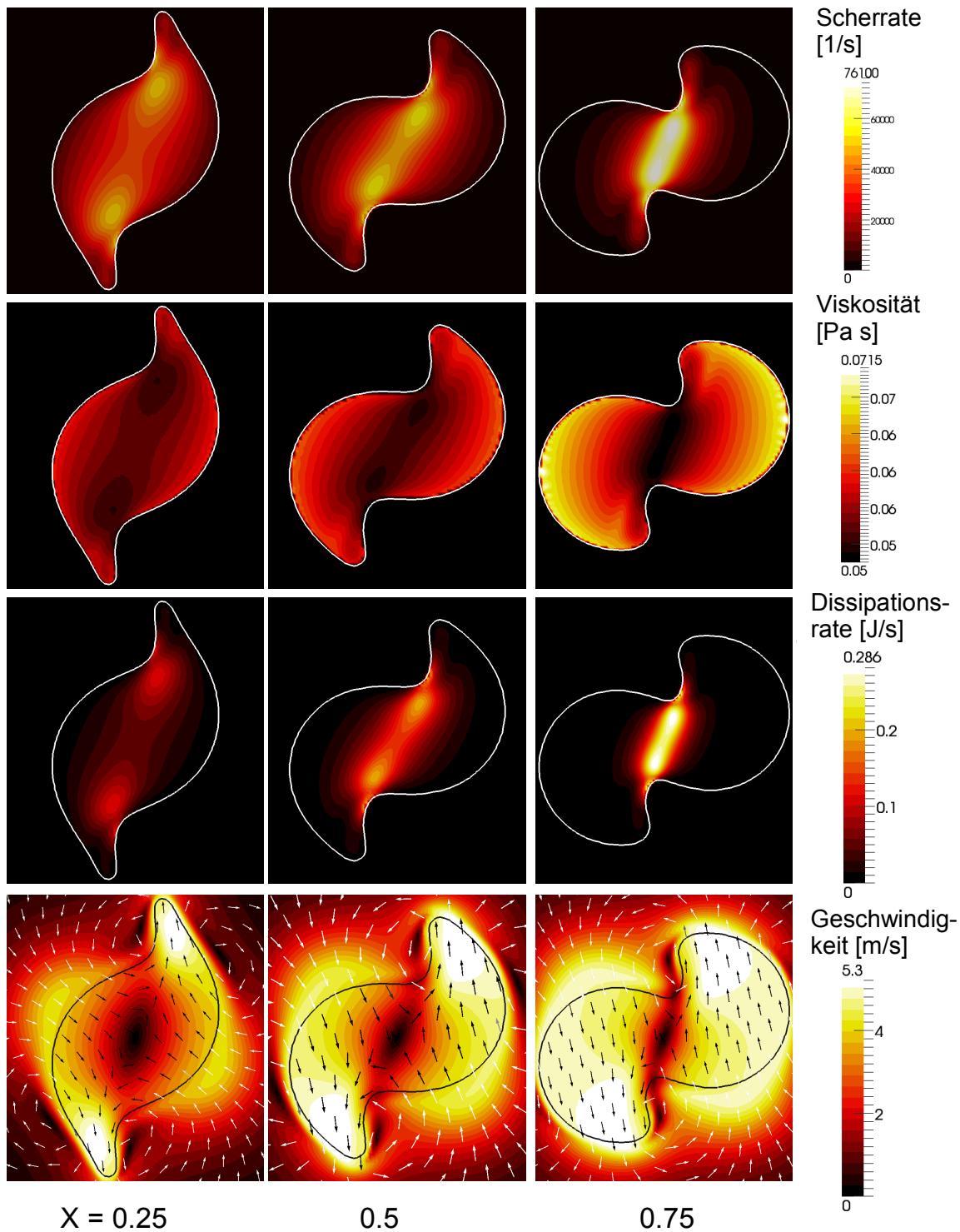


Abb. 7.21.: Strömung im Inneren kollidierender Tropfen einer scherverdünnenden Flüssigkeit, $t^* = 1.45$. Obere Reihe: Scherrate; zweite Reihe: Viskosität; dritte Reihe: Dissipationsrate; vierte Reihe: Geschwindigkeit.

können. Die Impulsdiffusion hat ihren Ursprung am Rand des Durchdringungsvolumens. Die Zeitskala der Impulsdiffusion τ_{mom} kann abgeschätzt werden durch

$$\tau_{\text{mom}} = \frac{L_{\text{ch}}^2 \rho}{\eta}. \quad (7.6)$$

Mit der effektiven Viskosität η und der charakteristischen Längenskala $L_{\text{ch}} = D_0/2$ ergibt sich $\tau_{\text{mom}} = 1.4 \cdot 10^{-3} \text{ s}$. Die maximale Dissipation tritt zu Beginn der Kollision auf, sodass die charakteristische Zeitskala der Tropfenkollision mit $D_0/U_{\text{rel}} = 5.5 \cdot 10^{-5} \text{ s}$ abgeschätzt werden kann. Dieser Wert ist 25 Mal kleiner als die Zeitskala der Diffusion, sodass die Diffusion nicht ausreichend Zeit hat, um die Flüssigkeit außerhalb des Durchdringungsvolumens zu erreichen. Folglich kann außerhalb des Durchdringungsvolumens keine signifikante viskose Dissipation auftreten.

3. Geschwindigkeitsfeld im Durchdringungsvolumen

Das Geschwindigkeitsfeld im Inneren des Durchdringungsvolumens (vierte Zeile in Abb. 7.21) zeigt eine Prallströmung überlagert mit einer Scherströmung. Die Energiebilanz in Abb. 7.24 zeigt, dass diese Strömung hoch dissipativ ist.

Diese drei Eigenschaften zeigen, dass die Dissipation hauptsächlich im Durchdringungsvolumen auftritt. Am meisten Energie wird bei der Kollision mit einem Versatz von 0.25 dissipiert, verteilt auf ein größeres Volumen. Im Gegensatz dazu zeigt der $X = 0.75$ Fall eine geringe Dissipation, mit dem größten Maximalwert aufgrund des kleinen Durchdringungsvolumens.

Analyse der Strömung in der Pralllamelle

Die Lamelle in Abbildung 7.22 zeigt eine nicht triviale Viskositätsverteilung. Im Viskositätsfeld können zwei lokale Viskositätsmaxima beobachtet werden, an der Übergangszone von Lamelle zu Rand und an dem äußeren Ende des Randes. Diese komplexe Viskositätsverteilung kann mit dem Geschwindigkeitsfeld erklärt werden. Abbildung 7.22, rechte Seite, zeigt ruhende Flüssigkeit in der Mitte des Kollisionskomplexes. Die Geschwindigkeit steigt nach außen an bis zu einem Geschwindigkeitsmaximum an der Lamelle-Rand-Übergangszone. Aufgrund der niedrigen Scherrate am Ort der maximalen Geschwindigkeit besteht an dieser Stelle ein Viskositätsmaximum. In der Umgebung des Geschwindigkeitsmaximums existieren hohe Scherraten, die eine verringerte Viskosität zur Folge haben. An der Spitze des Randes ist die Geschwindigkeit nahezu homogen, daher kann an dieser Stelle ein weiteres Maximum der Viskosität beobachtet werden. Der Energieverlauf in Abb. 7.24 zeigt, dass die Dissipation während der Lamellenphase, verglichen mit der Phase des initialen Kontaktes, gering ist.

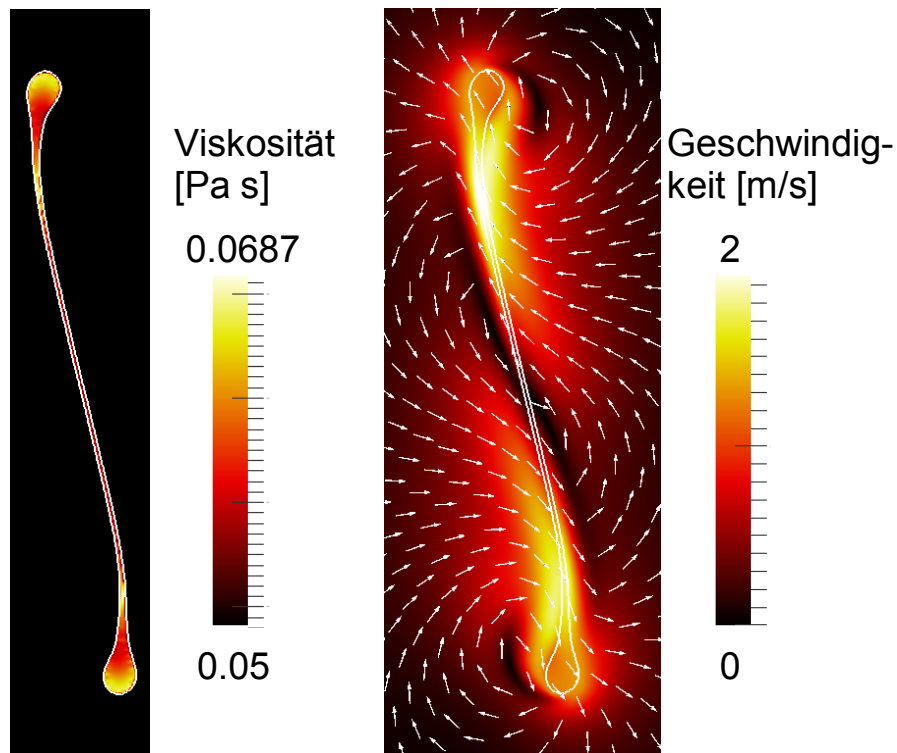


Abb. 7.22.: Viskosität (links) und Geschwindigkeit (rechts) in Inneren der Lamelle bei $t^* = 8.7$.

Viskosität

Die prinzipielle Entwicklung der mittleren Viskosität im Fall der scherverdünnenden Rheologie ist in Abbildung 7.23 dargestellt. Sie ist in allen Fällen ähnlich: Zuerst wird die mittlere Viskosität reduziert, erreicht ein globales Minimum und steigt dann wieder an. Die Viskosität steigt nicht monoton, sondern kann zusätzliche lokale Extremwerte aufweisen. Ein lokales Minimum der Viskosität entsteht, wenn die Seitenränder nach der Kontraktion der Lamelle zusammenfließen. Bei $X=0.25$ ist die Prallströmung des Randes so stark, dass der resultierende Kollisionskomplex die Geometrie einer abgeflachten Ellipse annimmt. Die anschließende Oszillation führt zu einem zweiten lokalen Minimum der Viskosität. Dieses Phänomen ist auch in der temporären Speicherung von Oberflächenenergie zu beobachten, siehe Detailansicht von Abb. 7.24.

Energie

Abbildung 7.24 zeigt die Entwicklung verschiedener Energieanteile für dezentrale Kollisionen scherverdünnender Tropfen. Die Linien mit Vierecken beschreiben die

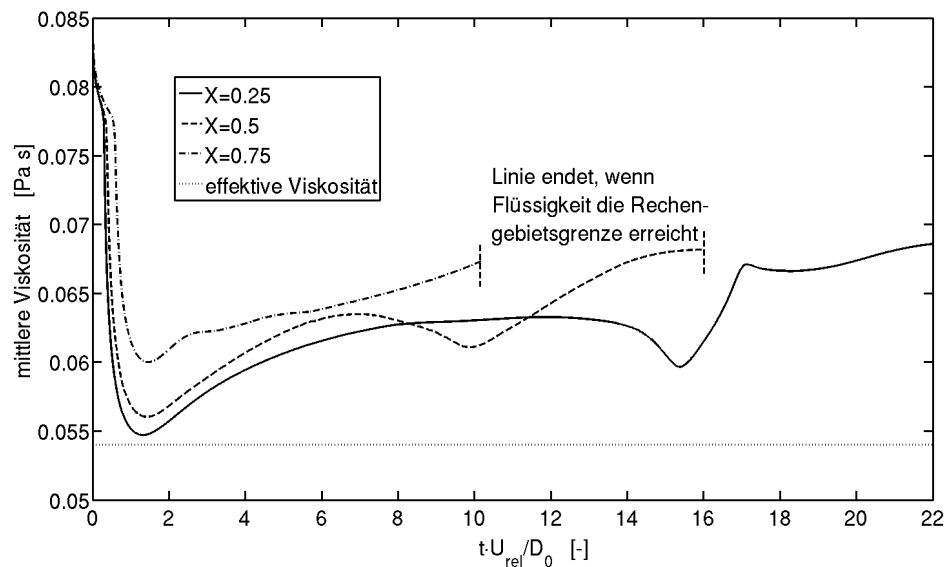


Abb. 7.23.: Evolution der mittleren Viskosität für unterschiedlichen Versatz.

Entwicklung der kinetischen Energie. Die kinetische Energie nimmt nach dem ersten Kontakt ab und erreicht ein lokales Minimum, während der Durchmesser des Kollisionskomplexes maximal ist. Im Fall von $X = 0.25$ steigt die kinetische Energie aufgrund der Kontraktion des Randes erneut an; nach der Kontraktion ist fast die gesamte kinetische Energie verschwunden. Die Linien mit Kreuzen beschreiben die Grenzflächenenergie. Diese steigt an, bis der maximale Durchmesser erreicht ist und nimmt anschließend ab. Die Linien mit Kreisen stellen die dissipierte Energie dar, die sehr schnell nach dem ersten Kontakt ansteigt. Die maximale Dissipationsrate tritt bei $t \approx D_{\text{rel}}/U_0$ auf. Während Expansion und Kontraktion des Stoßkomplexes wird kaum Energie dissipiert, lediglich bei der Verschmelzung des Randes ist ein weiterer Anstieg der Dissipationsrate zu beobachten.

Konzept der effektiven Viskosität

In Kapitel 7.3 wird beschrieben, dass eine geeignet gewählte (effektive) newtonsche Viskosität kollidierender Tropfen zur gleichen Dynamik wie die Kollision scherverdünnender Tropfen führt. Dieses Konzept der effektiven Viskosität wurde für zentrale Kollisionen gefunden. Die vorhergehenden Abschnitte zeigen, dass das Konzept der effektiven Viskosität auch für dezentrale Kollisionen gültig ist. Die Kollisionsdynamik scherverdünnender Tropfen und newtonscher Tropfen mit einer Viskosität von $\eta = 54 \text{ mPa s}$ ist nahezu identisch in allen untersuchten Fällen. Die Entwicklung des Durchmessers des Kollisionskomplexes kann mit einer Toleranz von weniger als 1 % reproduziert werden.

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Frage, warum die Kollision von Tropfen mit der effektiven Viskosität zu der gleichen Dynamik führt wie die Kollision scherver-

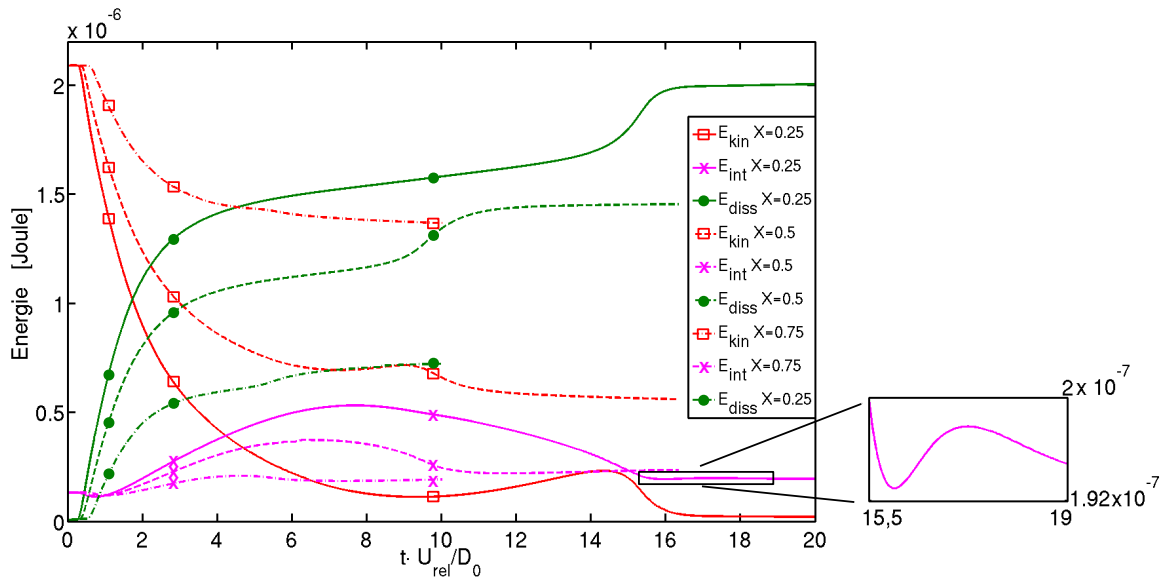


Abb. 7.24.: Zeitlicher Verlauf verschiedener Energieanteile während Kollisionen scherverdünnender Tropfen. Die Linien sind abgeschnitten, wenn die Flüssigkeit die Grenze des Rechengebietes erreicht. Die Detailansicht auf der rechten Seite zeigt ein zweites Maximum der Grenzflächenenergie im Fall von $X=0.25$.

dünnender Tropfen und wie der Wert der effektiven Viskosität zustande kommt. Der wichtigste Einfluss der scherverdünnenden Rheologie erfolgt während der Anfangsphase, bei der auch die kleinste mittlere Viskosität auftritt. Sie variiert von 54.8 bis 60 mPa s, abhängig vom Versatz der Tropfen. Die newtonsche Viskosität, die zu der gleichen Kollisionsdynamik führt, beträgt 54 mPa s und liegt somit unterhalb der mittleren Viskosität der scherverdünnenden Tropfen. Daher kann die kleinste mittlere Viskosität nicht als Schätzwert für die effektive Viskosität verwendet werden.

Eine Möglichkeit wäre, dass die mittlere Viskosität in einem Teil des Kollisionskomplexes der effektiven Viskosität entspricht. Die Berechnung der mittleren Viskosität berücksichtigt nicht die inhomogene Verteilung der lokalen Dissipation im Inneren der Tropfen. Daher ist die Berechnung einer angepassten mittleren Viskosität, die auch die Verteilung der Dissipation berücksichtigt, eine Möglichkeit, um die effektive Viskosität zu finden. Die Auswahl dieser Teilmenge basiert auf einem Schwellenwert für die mittlere Dissipation. Dabei wird die Hälfte der mittleren Dissipation als ein Schwellenwert genutzt, und es wird der Zeitpunkt der kleinsten mittleren Viskosität genutzt ($t^* = 1.45$), um die effektive Viskosität zu bestimmen. Der Teil des Kollisionskomplexes mit einer Dissipation unterhalb des Schwellenwerts wird nicht in die Berechnung der mittleren Viskosität einbezogen. Die so gewonnen mittleren Viskositäten sind in Tabelle 7.5 aufgeführt.

Die Berechnung des Mittelwertes der Viskosität unter Berücksichtigung des Schwellenwerts liefert die effektive Viskosität mit einer Genauigkeit von besser

| Versatz | mittlere Viskosität [mPa s] | mittlere Dissipations- rate [W] | mittlere Viskosität mit Schwellenwert [mPa s] |
|---------|--------------------------------|------------------------------------|--|
| 0.25 | 54.77 | 0.0443 | 53.81 |
| 0.5 | 56.04 | 0.0538 | 53.88 |
| 0.75 | 60.0 | 0.0291 | 53.9 |

Tabelle 7.5.: Mittlere Viskosität und Dissipationsrate bei $t^* = 1.45$.

als 0.2 %. Die Entwicklung der mittleren Viskosität mit und ohne Verwendung des Schwellenwerts ist in Abb. 7.25 dargestellt. Der Verlauf der mittleren Viskosität unter Verwendung des vollständigen Kollisionskomplexes zeigt eine langsame Abnahme nach dem Kontakt der Tropfen. Unter Verwendung des reduzierten Kollisionskomplexes ist der Verlauf zunächst nahezu konstant und verringert sich dann bei Kontakt der Tropfen abrupt auf ein Niveau, das leicht unter der effektiven Viskosität liegt. Anschließend steigt die Viskosität der Tropfen moderat. Die Kurven verschiedenen Versatzes kreuzen sich bei $t^* = 1.5$. Die Entwicklung der Energie (Abb. 7.24) zeigt, dass der Großteil der Energie etwa zu diesem Zeitpunkt dissipiert wird.

Die Nutzung des Schwellenwerts hat zur Folge, dass nur die für die Dissipation relevanten Teile des Kollisionskomplexes in die Berechnung der mittleren Viskosität eingehen. Die Sensitivität gegen den Schwellenwert ist niedrig, eine Variation von $\pm 10\%$ des Schwellenwertes führt in allen Fällen zu einer Ungenauigkeit in der Bestimmung der effektiven Viskosität von maximal 0.52 %.

Mit diesem Ansatz kann die effektive Viskosität effizient durch die Simulation der Anfangsphase der Kollision und Analyse von Phasenindikatorfeld, Viskosität und Dissipationsrate gefunden werden.

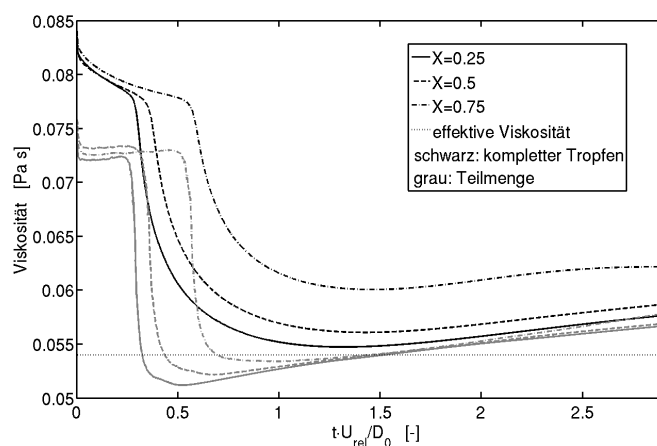


Abb. 7.25.: Viskosität mit und ohne Verwendung des Schwellenwerts in der Anfangsphase der Kollision.

Die durchgeführten Simulationen von Tropfenkollisionen mit scherverdünnenden Flüssigkeiten zeigen eine Vergrößerung des Kollisionskomplexes im Vergleich zum newtonschen Fall bei identischer Weberzahl. Der gleiche Effekt wird in Experimenten^[69] beobachtet. Die experimentell aufgenommenen Geometrien des Kollisionskomplexes wurden von der Simulation korrekt vorhergesagt. Die Erweiterung des Codes ermöglicht somit die Simulation von Zweiphasenströmungen für diese Klasse von nichtnewtonschen Flüssigkeiten.

Unterschiedliche Kollisionsphasen werden identifiziert und der Mechanismus der dominierenden Strömungsform kann für jede Phase angegeben werden. Simulierte Viskositätsfelder zeigen, dass die Viskosität in allen Phasen der Kollisionen inhomogen und lokal stark reduziert ist.

Die Tropfenkollisionen mit scherverdünnender Rheologie werden mit newtonscher Rheologie verglichen. Eine konstante effektive Viskosität kann bestimmt werden, die zum gleichen Stoßkomplexdurchmesser führt, wie die scherverdünnende Flüssigkeit. Die Kollisionen der newtonschen Tropfen mit der effektiven Viskosität zeigen die gleiche Dynamik wie Kollisionen scherverdünnender Tropfen. Die Evolution der Geometrie des Kollisionskomplexes wird mit einer Toleranz von weniger als 1 % wiedergegeben. Das Konzept der effektiven Viskosität ist für zentrale und dezentrale Kollisionen scherverdünnender Tropfen gültig.

Die Analyse der Energieevolution zeigt, dass fast die gesamte viskose Dissipation während einer kurzen Zeitspanne zu Beginn der Kollision auftritt. Die Viskosität wirkt nur in diesem kurzen Zeitintervall, sodass ihr Einfluss auf die Kollisionsdynamik unter Verwendung einer effektiven Viskosität wiedergegeben werden kann. Die höchste Dissipationsrate tritt im Zentrum des Kollisionskomplexes auf. Ein effizienter Weg, um die effektive Viskosität zu finden, ist die Berechnung einer mittleren Viskosität in einem reduzierten Bereich des Stoßkomplexes während der Anfangsphase der Kollision.

8 Kollision von Tropfen mit viskoelastischen Fließeigenschaften

Stand des Wissens

Bei dem Zerstäuben von Polymerlösungen und -schmelzen kommt viskoelastisches Fließverhalten in den Fokus. In der vorliegenden Arbeit wird der Einfluss des viskoelastischen Fließverhaltens auf Tropfenkollisionen untersucht. Dabei steht insbesondere die Gewinnung von grundlegendem Verständnis für diesen tropfendynamischen Elementarprozess im Vordergrund. Die in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse sind zum Teil im Rahmen einer durch den Autor betreuten Masterarbeit von M. Sc. Muyuan Liu (2013)^[61] entstanden.

Neben experimentellen Untersuchungen existieren numerische Arbeiten, die Zweiphasenströmungen mit mindestens einer viskoelastischen Phase betrachten. Im Folgenden sind numerische Arbeiten zu viskoelastischen Zweiphasenströmungen aufgeführt.

Mooney et al. (2009)^[67,68] untersuchen die Kollision viskoelastischer Tropfen numerisch. Im Vergleich mit Kollisionen newtonscher Tropfen wird bis zum Zerfall kein großer Unterschied beobachtet, das Zerfallen selbst wird gehemmt. Die Ergebnisse zeigen daher eine Verschiebung der Grenze Koaleszenz/Separation zu einem höheren Versatz bzw. zu höheren Weberzahlen. Der stabilisierende Effekt wird auf elastische Spannungen zurückgeführt, eine Analyse der zugrunde liegenden Polymermolekülkonfiguration wird allerdings nicht durchgeführt. Aggarwal und Sarkar^[1] untersuchen die Deformation und die Separation eines viskoelastischen Oldroyd-B Tropfens in newtonscher Matrix in stationärer Scherströmung. Die Viskoelastizität hat eine stabilisierende Wirkung, sodass der Zerfall der Tropfen erst bei höheren Scherkräften erfolgt. Chrisspell et al.^[21] analysieren die Oszillation eines viskoelastischen Oldroyd-B Tropfens in einem viskoelastischen Fluid. Sie beobachten, dass die Oszillationsfrequenz durch die Viskoelastizität zunächst erhöht wird und bei steigender Relaxationszeit wieder absinkt. Harvie et al.^[46] simulieren einen viskoelastischen Oldroyd-B Tropfen, der durch einen Kanal mit Querschnittsänderungen strömt. Die Ergebnisse zeigen die Entwicklung eines Einschnitts am Tropfenende. Mukherjee und Sarkar (2011)^[70] untersuchen einen viskoelastischen Tropfen, der in einem viskosen Fluid sinkt. Sie beobachten eine Vertiefung auf der Oberseite des

Tropfens. Mit steigender Relaxationszeit des viskoelastischen Fluids vergrößert sich die Vertiefung. Mehrere Arbeiten untersuchen den Aufstieg einer Gasblase in einem viskoelastischen Fluid numerisch^[81,92,123]. In diesen Arbeiten wird die Ausbildung einer Spitze am unteren Ende der Blase in Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen erfasst. Eine erhöhte viskoelastische Spannung führt zum Ablösen einer Sekundärblase vom Blasenende. Im Nachlauf der Blase bildet sich eine Strömung entgegen der Aufstiegsrichtung, die ebenfalls in Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen erfasst wird. Jiménez et al.(2005)^[54] untersuchen den Aufstieg einer Blase in viskoelastischem Fluid bis zum Zerplatzen der Blase an der Oberfläche und vergleichen die Ergebnisse mit einem Aufstieg in newtonschem Fluid. Aus dem Zerplatzen der Blase resultiert ein Flüssigkeitsstrahl, der im Fall der newtonschen Flüssigkeit höher steigt. Der Zerfall des Strahls in Satellitentropfen tritt nur bei der newtonschen Flüssigkeit auf. Favero et al.(2010)^[33] simulieren den Austritt einer viskoelastischen Flüssigkeit aus einer Düse und können die Aufweitung des Strahls hinter der Düse erfassen. Bonite et al.(2009)^[11] simulieren eine viskoelastische Flüssigkeit, die zwischen zwei Platten gedehnt wird. Während sich bei einer newtonschen Flüssigkeit ein Ligament mit minimaler Dicke in der Mitte bildet, ist der Ligamentradius bei der viskoelastischen Flüssigkeit konstant.

Umsetzung des Oldroyd-B Modells in FS3D

Eine zentrale Kenngröße der viskoelastischen Fluide ist die Weissenbergzahl $Wi = \dot{\gamma}\lambda$ mit der Scherrate $\dot{\gamma}$ und der Relaxationszeit λ . In numerischen Simulationen von viskoelastischen Strömungen ist die Weissenberg Zahl wichtig, weil hohe Weissenbergzahlen zur Divergenz der numerischen Iteration führen können. Dieses Verhalten ist als High Weissenberg Number Problem (HWNP) bekannt^[55]. Um den HWNP zu überwinden, muss die numerische Lösung die positive Definitheit des Konfigurationstensors garantieren. Daher wurde das Positive Definitness Preserving Scheme (PDPS) von Stewart et al.^[117] in FS3D implementiert, sodass die Berechnung einer viskoelastischen Strömung bei hohen Weissenbergzahlen ohne Stabilitätsprobleme möglich ist. Es existieren noch weitere numerische Verfahren zur Erhaltung der positiven Definitheit^[7,31,32]; aufgrund des effizienten Algorithmus wurde hier dem PDPS der Vorzug gegeben.

Die Implementierung des PDPS ist in Stewart et al.^[117] beschrieben. Um Zweiphasenströmungen stabil berechnen zu können, müssen die elastischen Spannungen am Interface geeignet behandelt werden. Die in Stewart et al.^[117] beschriebene Vorgehensweise der Spannungsextrapolation am Interface hat sich als ungeeignet erwiesen. Daher wird eine alternative Methode verwendet, bei der die Polymerviskosität mit dem Phasenindikator geblendet wird. Es wird ein η_p^Ω gemäß

$$\eta_p^\Omega = \eta_p \cdot f \quad (8.1)$$

berechnet, welches für das gesamte Rechengebiet gilt und in der kontinuierlichen Phase null ist. Für den Fall einer viskoelastischen Matrix wird entsprechend mit $1-f$ multipliziert, sodass η_p^Ω in der dispersen Phase null ist.

Die Zeitschrittbegrenzung im Fall viskoelastischer Fluide lautet

$$\Delta t \leq \frac{1}{6} \frac{\Delta x}{|\mathbf{v}|_{\max}} = \frac{1}{6} \text{CFL}, \quad (8.2)$$

d.h. die Courant-Zahl CFL darf den Wert $1/6$ nicht überschreiten^[117].

Als Randbedingung für \mathbf{A} wird eine homogene Neumann-Randbedingung verwendet, d.h. in den Dummyzellen wird \mathbf{A} durch lineare Extrapolation berechnet. Für den linken Rand (Index $i = 0$) gilt beispielsweise

$$\mathbf{A}_{0,j,k} = 2\mathbf{A}_{1,j,k} - \mathbf{A}_{2,j,k}. \quad (8.3)$$

Dehnung und Orientierung der Polymermoleküle

Wie bereits in Kapitel 2.2 erwähnt, kann das Oldroyd-B Modell aus einem mikroskopischen Modell von Polymermolekülen hergeleitet werden. Deren gemittelte Eigenschaften werden durch den Konfigurationstensor \mathbf{A} repräsentiert. Die Wurzel der Spur des Konfigurationstensors $\sqrt{\text{tr}(\mathbf{A})}$ beschreibt die mittlere Polymerlänge^[46]. Bei $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ bzw. $\sqrt{\text{tr}(\mathbf{A})} = \sqrt{3}$ im 3-dimensionalen Fall sind die Polymermoleküle entspannt. Der Haupteigenvektor von \mathbf{A} gibt die mittlere Orientierung der Polymermoleküle an^[46]. Bei $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ haben die Polymermoleküle keine Orientierung. Die Berechnung der Haupteigenvektoren kann auf die Lösung einer kubischen Gleichung reduziert werden. In Ausnahmefällen führt das zu Problemen, daher wurde die sogenannte POWER-Iterationsmethode zur Berechnung des Haupteigenvektors von \mathbf{A} in FS3D implementiert^[66].

8.1 Validierung

Die Implementierung des Oldroyd-B Modells in dem Programmpaket Free Surface 3D (FS3D) wird anhand einer Spaltströmung, einer Lid-Driven-Cavity Strömung und eines oszillierenden Tropfens validiert. Für die Spaltströmung eines Oldroyd-B Fluids können die Navier-Stokes Gleichungen analytisch gelöst werden. Für die Geschwindigkeiten und Spannungen ergibt sich

$$u = \frac{\partial_x p}{2(\eta_s + \eta_p)} (y^2 - yH), \quad v = 0, \quad (8.4)$$

$$\tau_{xx} = \frac{(\partial_x p)^2 2\lambda\eta_p}{(\eta_s + \eta_p)^2} \left(y - \frac{H}{2}\right)^2, \quad \tau_{xy} = \frac{(\partial_x p)\eta_p}{(\eta_s + \eta_p)} \left(y - \frac{H}{2}\right), \quad \tau_{yy} = 0. \quad (8.5)$$

Das Setup für diesen Testfall ist in Abbildung 8.1 dargestellt. Der Kanal ist $8 \cdot 10^{-2}$ m lang, hat eine Spaltweite von $2 \cdot 10^{-2}$ m und wird mit 160×40 Zellen aufgelöst. Am Einlass werden die Geschwindigkeit und die Spannung gemäß Gleichung 8.4 und Gleichung 8.5 vorgegeben. Am Auslass wird eine homogene Neumann Randbedingung für die Geschwindigkeit vorgegeben; für die Spannung muss hier keine Randbedingung vorgegeben werden. Das Ergebnis für die Spannungskomponente τ_{xx} ist in Abb. 8.1 für eine Weissenbergzahl von 0.1, 0.5 und 1 dargestellt. Die numerischen Lösungen stimmen mit den analytischen Lösungen überein, die maximale Abweichung im Bereich der maximalen Spannung beträgt 0.5 % bei einer Weissenbergzahl von 0.1, bei $Wi = 0.5$ beträgt die Abweichung 0.6 % und 3.8 % bei $Wi = 1$. Bei Weissenbergzahlen deutlich größer als 1 divergiert die numerische Iteration.

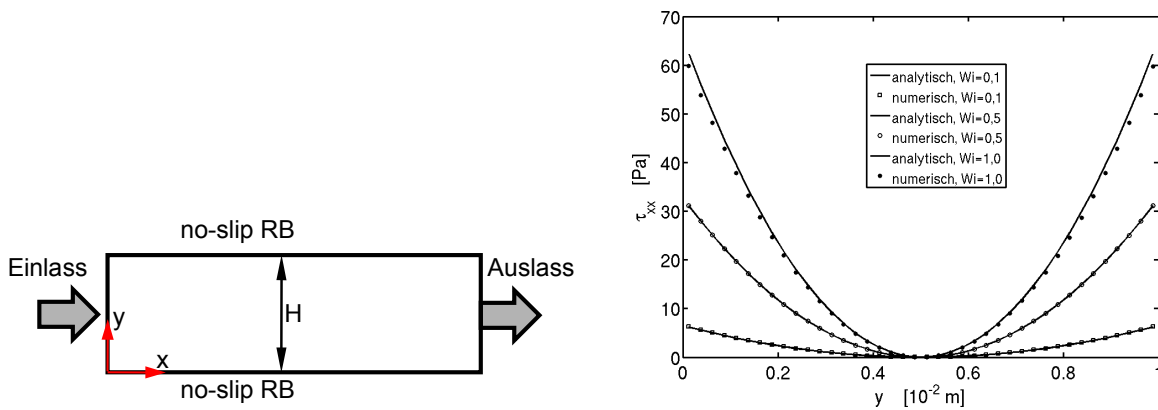


Abb. 8.1.: Setup und Normalspannung bei der Kanalströmung eines Oldroyd-B Fluids.

Eine weitere Validierung wird anhand einer Lid-Driven-Cavity Strömung durchgeführt. Dabei bewegt sich eine Wand des rechteckigen Rechengebietes tangential und treibt das Fluid im Inneren an. Das Setup ist in Abbildung 8.2 dargestellt. Das Strömungsgebiet wird mit 64^2 , 128^2 und 256^2 Zellen aufgelöst. Die Strömung in diesem Testfall ist erheblich komplexer als bei der Spaltströmung, daher ist eine analytische Lösung nicht möglich. Es existieren numerische Lösungen in der Literatur^[128], mit denen verglichen wird. Die Ergebnisse für verschiedene Auflösungen sind in Abb. 8.2 dargestellt. Es wird eine gute Übereinstimmung mit Literaturwerten beobachtet, bei der maximalen Auflösung liegt die Abweichung bei 0.6 % im Bereich der Minimalgeschwindigkeit.

Um die Implementierung des Oldroyd-B Modells auch für den Fall einer zweiphasigen Strömung zu validieren, wurde ein ausgelenkter viskoelastischer Tropfen simuliert, der sich aufgrund von Oberflächenspannung zurückzieht. Das Setup ist in Abbildung 8.3 dargestellt. Die Literaturergebnisse zeigen, dass die Abnahme der relativen Auslenkung des Tropfens für verschiedene Tropfenfluide unterschiedlich ist^[132]. Die Referenzlösung und die Lösung von FS3D sind in Abb. 8.3 dargestellt und zeigen eine gute Übereinstimmung bei einer Abweichung von 1 %.

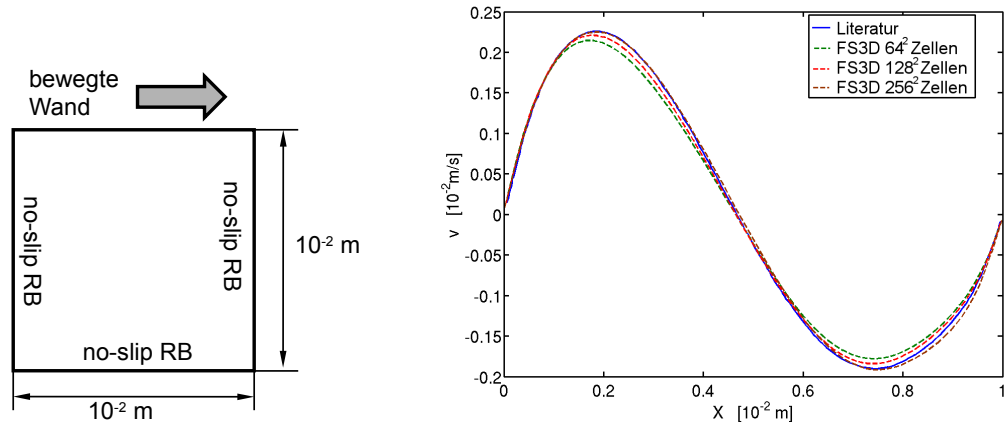


Abb. 8.2.: Setup und Geschwindigkeitsverteilung einer Lid-Driven-Cavity Strömung eines Oldroyd-B Fluids.

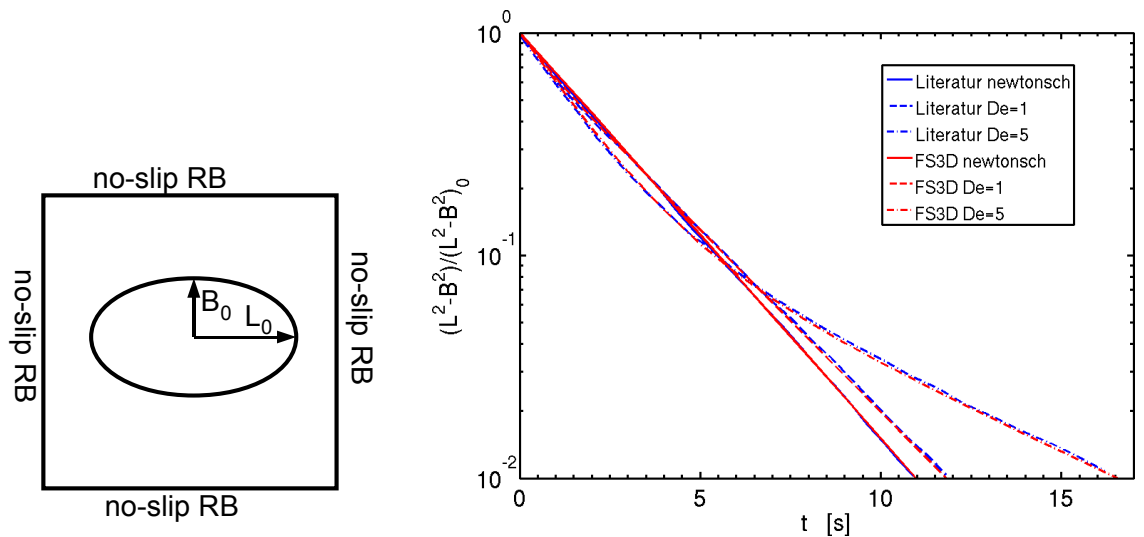


Abb. 8.3.: Setup und relative Auslenkung bei der Simulation eines viskoelastischen Tropfens in newtonscher Matrix.

Energiebilanz für ein Oldroyd-B Fluid

Bei der Kollision viskoelastischer Tropfen muss zusätzlich zu den in Kapitel 3.4 beschriebenen Energieanteilen eine elastische Spannenergie und eine zusätzliche Dissipation berücksichtigt werden. Mechanische Energie kann in den gedehnten Polymermolekülen als potenzielle Energie gespeichert und nach Relaxation wieder freigegeben werden^[7]. Sie wird berechnet gemäß

$$E_{\text{pot}}^{\text{el}} = \frac{1}{2} \int_V \frac{\eta_p}{\lambda} \text{tr}(\mathbf{A} - \mathbf{I}) dV. \quad (8.6)$$

Die Dissipation in einer viskoelastischen Strömung hat einen viskosen Anteil und einen viskoelastischen Anteil. Für ein Oldroyd-B Fluid ist die zusätzliche Dissipationsrate gegeben durch^[124]

$$\dot{E}_{\text{diss}}^{\text{el}} = \frac{1}{2} \int_V \frac{\eta_p}{\lambda^2} (\text{tr} \mathbf{A} + \text{tr} \mathbf{A}^{-1} - 6) dV. \quad (8.7)$$

Der viskoelastische Anteil der dissipierten Energie $E_{\text{diss}}^{\text{el}}$ ergibt sich durch zeitliche Integration der Dissipationsrate, siehe auch Kap. 3.4.

Verifizierung der Energieausgabe

Um die Implementierung des viskoelastischen Anteils der dissipierten Energie und der elastischen potenziellen Energie zu verifizieren, wird ein Testfall betrachtet, bei dem zwei rechteckige Volumen mit einem viskoelastischen und einem viskosen Fluid in einem quadratischen Rechengebiet initialisiert werden, siehe Abbildung 8.4. Die Größe des Gebiets beträgt $0.01 \times 0.01 \text{ m}^2$. Der zweidimensionale Testfall wird in einem dreidimensionalen Rechengebiet mit einer Auflösung von einer Zelle in Dickenrichtung realisiert.

Die Gravitation wird mit $g = 10 \text{ m/s}^2$ eingestellt. Aufgrund des Dichteunterschieds fließt das viskoelastische Fluid nach unten. Die potenzielle Energie beträgt

$$E_{\text{pot}} = \frac{Vg}{2} (\rho_1 h_1 + \rho_2 h_2), \quad (8.8)$$

mit der Höhe des Schwerpunkts der beiden Phasen h_1 und h_2 . Um die Anzahl der Energieterme zu reduzieren, wird die Oberflächenspannung auf null gesetzt. Das Rechengebiet wird mit 32×32 Gitterzellen aufgelöst und besitzt reibungsbehaftete Wände. Das Setup ist in Abbildung 8.4 dargestellt. Auf der rechten Seite ist der Verlauf der einzelnen Energieanteile und der Energiesumme dargestellt. Die maximale Abweichung der Energiesumme beträgt weniger als 1.3% vom Anfangswert. Die Energieerhaltung ist im Rahmen der verwendeten Auflösung gewährleistet und es kann davon ausgegangen werden, dass die Energieausgabe richtig implementiert ist. Die Abweichungen sind vermutlich auf die unterschiedliche Mittelung von Geschwindigkeit und Viskosität in der Ausgabe und der Lösung der Impulsgleichung zurückzuführen.

| Fluid 1 | Fluid 2 |
|--|---|
| $\rho_1 = 10^3 \text{ kg/m}^3$ | $\rho_2 = 1 \text{ kg/m}^3$ |
| $\mu_{s1} = 0.005 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ | $\mu_{s2} = 0.01 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ |
| $\mu_p = 0.005 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ | |
| $\lambda = 0.1 \text{ s}$ | |
| | $\sigma = 0$ |

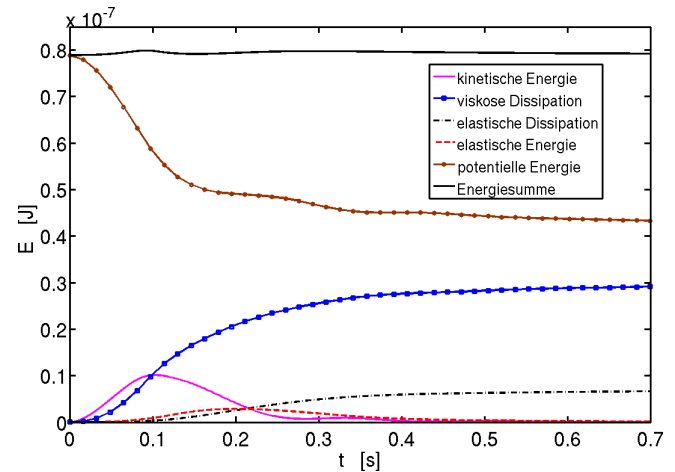


Abb. 8.4.: Setup und Energieverlauf in einer Simulation für die Validierung der Ausgabe der elastischen potenziellen Energie und des elastischen Anteils der Dissipation.

8.2 Ergebnisse

Durchführung der Simulationen

Der Durchmesser der Tropfen beträgt $1 \cdot 10^{-3} \text{ m}$, die Relativgeschwindigkeit 0.02 m/s . Die Solvent- und Polymerviskosität betragen $0.5 \text{ mPa} \cdot \text{s}$, die Viskosität der newtonschen Flüssigkeit beträgt $1 \text{ mPa} \cdot \text{s}$. Die Dichte wird mit 1000 kg/m^3 eingestellt. Die Relaxationszeiten werden variiert und betragen $5 \cdot 10^{-3}$, 0.05 und 0.5 s . Die Eigenschaften des umgebenden Gases werden mit $\eta_g = 0.018 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ und $\rho_g = 1.2 \text{ kg/m}^3$ eingestellt; die Oberflächenspannung beträgt $1 \cdot 10^{-5} \text{ N/m}$. Mit diesen Werten ergibt sich eine Weberzahl von 40 und eine Reynoldszahl von 20. Die Deborahzahl, die das Verhältnis von Relaxationszeit zu einer charakteristischen Strömungszeit beschreibt, ist definiert als $De = \lambda U_{\text{rel}}/D_0$ und beträgt 0.1, 1 oder 10. Die Rechengebietsgröße beträgt bei der Simulation von zentralen Kollisionen $3.2 \times 1.6 \times 1.6 D_0$ und wird mit $64 \times 32 \times 32$ Zellen aufgelöst; das entspricht einer relativen Auflösung von 20 Zellen/ D_0 . Die Simulationen der zentralen Tropfenkollisionen werden mit 3 Symmetrieebenen durchgeführt, um den Rechenaufwand zu reduzieren. Die Simulationen der dezentralen Kollisionen werden in einem Rechengebiet mit der Größe $6.4 \times 1.6 \times 3.2 D_0$ durchgeführt, wobei die relative Auflösung von 20 Zellen/ D_0 nicht geändert wird; es wird eine Symmetrieebene genutzt. An den anderen Rändern werden eine homogene Neumann-Randbedingung für die Geschwindigkeit und ein konstanter Druck eingestellt. Das Setup ist in Tabelle A.11 zusammengefasst.

Bei den Kollisionen wird der Einschluss einer kleinen Gasblase beobachtet. In vielen Simulationen entstehen in der Nähe dieser Blasen unphysikalisch große Ge-

schwindigkeiten, die zur Divergenz der numerischen Iteration führen. Um den Einschluss von Gasblasen zu vermeiden, werden die Tropfen so initialisiert, dass der Abstand der Mittelpunkte $0.99 D_0$ beträgt, d.h. die Tropfen sind bereits bei Simulationsbeginn in Kontakt. Auch mit diesem Setup entsteht bei einigen Simulationen eine unphysikalisch hohe Geschwindigkeit. Diese tritt in der Kontaktzone an der Grenzfläche auf und führt ebenfalls zur Divergenz der numerischen Iteration. Wenn es zur Divergenz der numerischen Iteration kommt, sind in allen Fällen vorher unphysikalisch hohe Geschwindigkeiten in der Nähe der Grenzfläche zu beobachten.

Es wurden verschiedene Einstellungen untersucht, um die Probleme zu umgehen. Die Ergebnisse zeigen:

- Die Berechnung der Polymerviskosität im Rechengebiet (Gl. 8.1) mit einem geglätteten Phasenindikatorfeld hat keinen Einfluss auf die Stabilität.
- Die Stabilität ist abhängig von der Relaxationszeit, es konnte jedoch keine kritische Relaxationszeit gefunden werden.
- Durch extrem kleine Zeitschritte Δt wird die Stabilität nicht erhöht.
- Eine feine Gitterauflösung führt bei vielen Simulationen zur Divergenz der numerischen Iteration.
- Der Einschluss einer Blase bei der Kollision der Tropfen muss vermieden werden.

Das oben beschriebene Setup mit einer relativen Auflösung von 20 Zellen/ D_0 ermöglicht eine Simulation der Tropfenkollisionen ohne das Auftreten von numerischen Instabilitäten. Der Zusammenhang von hoher Gitterauflösung und verringerter Stabilität der numerischen Iteration bei der Simulation von viskoelastischem Fließverhalten wird von Keunings^[55] für Problemstellungen beschrieben, die eine Singularität enthalten.

Zentrale Tropfenkollision

Die zentralen Kollisionen führen in allen untersuchten Fällen zu Koaleszenz. Der Kollisionsvorgang kann in folgende Phasen unterteilt werden:

1. In der ersten Phase expandiert der Stoßkomplex in Radialrichtung. Die Tropfen kollidieren und das Fluid wird nach außen gedrängt (Expansionsphase).
2. In der zweiten Phase schrumpft der Stoßkomplex in Radialrichtung und expandiert in Axialrichtung (Kontraktionsphase).

3. Sobald der Stoßkomplex die maximale Deformation in Axialrichtung erreicht hat, zieht er sich wieder zusammen und oszilliert (Oszillationsphase).

In Abbildung 8.5 ist die Evolution des Stoßkomplexdurchmessers für die unterschiedlichen Deborahzahlen dargestellt. Zusätzlich ist die Kollision newtonscher Tropfen mit $\eta_0 = \eta_P + \eta_S$ und mit halbierter Viskosität dargestellt. Folgende Phänomene können beobachtet werden: Die Amplitude der Oszillation steigt mit der Deborahzahl, die Kollisionsdynamik bei $De = 0.1$ entspricht in guter Näherung dem newtonschen Fall, die Deborahzahl 10 führt zu der Dynamik der Kollision mit halbierter Viskosität. Eine Erhöhung der Oszillationsfrequenz ist für eine Deborahzahl von 1 zu beobachten.

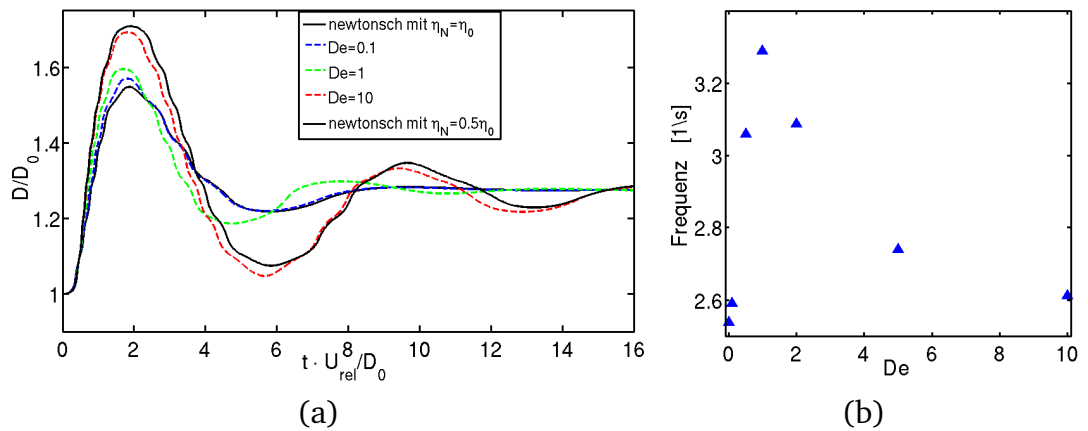
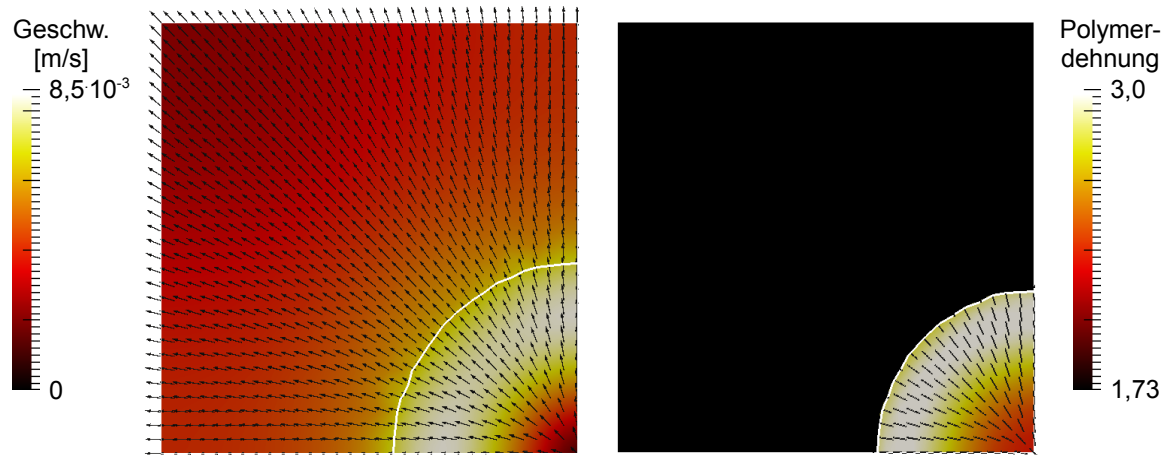
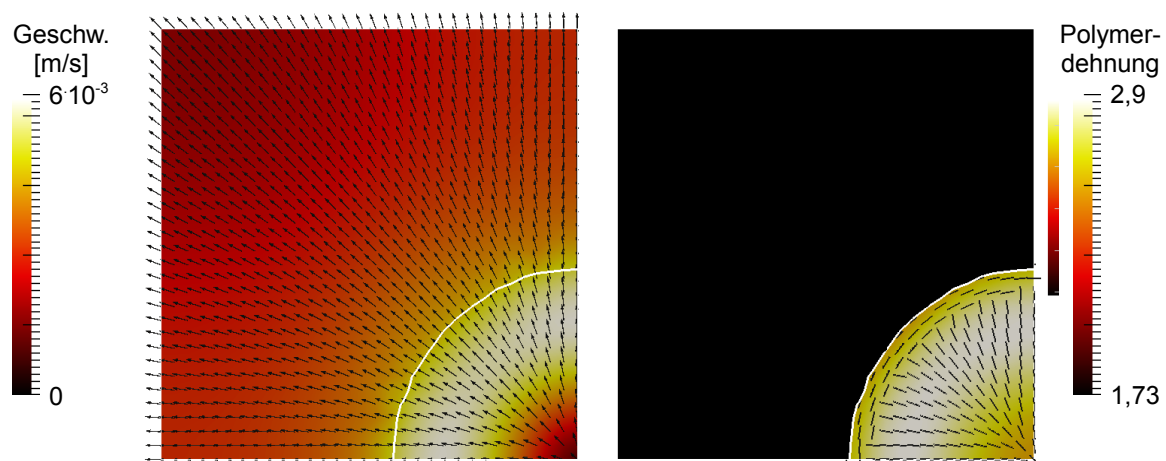


Abb. 8.5.: Stoßkomplexdurchmesser als Funktion der dimensionslosen Zeit $t^* = t \cdot U_{rel}/D_0$ für eine viskoelastische Flüssigkeit mit unterschiedlicher Deborahzahl und newtonsche Fluide mit η_0 bzw. $0.5 \eta_0$. Rechts ist die Oszillationsfrequenz als Funktion der Deborahzahl dargestellt.

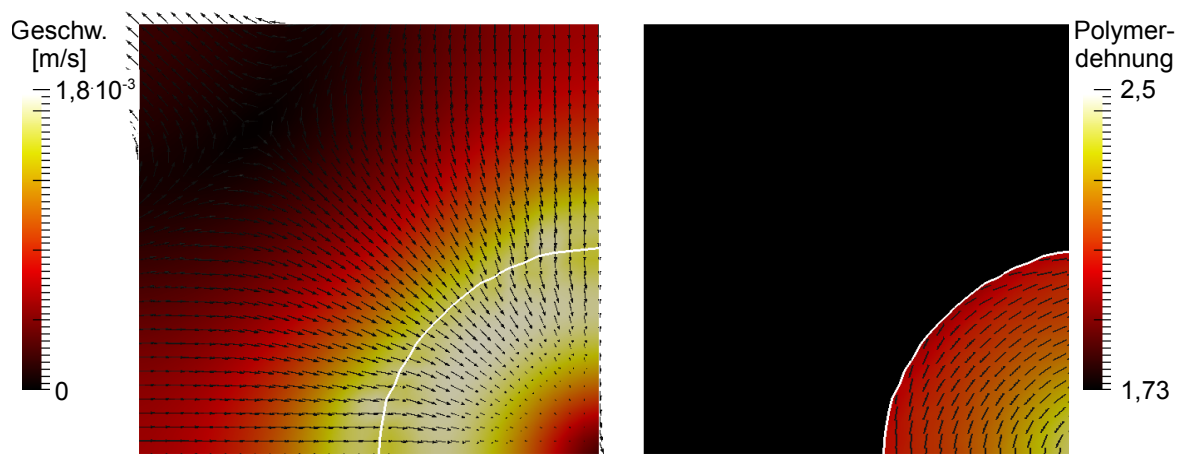
Für das Verständnis dieser Phänomene müssen die Orientierung und die Dehnung der Polymermoleküle in den einzelnen Phasen analysiert werden. In Abbildung 8.6 sind das Geschwindigkeitsfeld in der Prallebene sowie die gemittelten Eigenschaften der Polymermoleküle für die Kollision mit der Deborahzahl 1 dargestellt. Zu Beginn der Expansionsphase sind die Geschwindigkeitsvektoren und die Polymermoleküle radial nach außen gerichtet. Die Polymermoleküle erreichen in dieser Phase ihre maximale Dehnung und wirken der Strömung entgegen. Am Ende der Expansionsphase, Abb. 8.6(b), führt die Abbremsung der Strömung zu einer Umorientierung der Polymermoleküle in Umfangsrichtung. Die elastischen Kräfte unterstützen die Abbremsung der Strömung. In der Kontraktionsphase, Abb. 8.6(c), sind alle Polymermoleküle in Umfangsrichtung angeordnet. Obwohl die Polymermoleküle bereits weniger gedehnt sind, wird die Kontraktionsbewegung weiterhin unterstützt. Im Fall von $Deborah = 1$ ist die Zeit für den Wechsel zwischen Beschleunigung und Abbremsung der Strömung gleich der Relaxationszeit, daher haben die viskoelastischen Kräfte einen Einfluss auf die Oszillationsfrequenz.



(a) $t^* = 0.64$



(b) $t^* = 0.96$



(c) $t^* = 2.24$

Abb. 8.6.: Geschwindigkeitsfeld sowie mittlere Orientierung und Dehnung der Polymermoleküle zu verschiedenen Zeiten $t^* = t \cdot U_{\text{rel}}/D_0$. Die Polymerlänge von 1,73 entspricht einem entspannten Polymermolekül.

Abbildung 8.5(b) zeigt, dass die Frequenz für sehr hohe Deborahzahlen und für sehr kleine Deborahzahlen mit der Oszillationsfrequenz des newtonschen Falls übereinstimmt. Der Grund dafür ist, dass sehr kleine Deborahzahlen zu einer instantanen Wirkung der elastischen Kräfte führen. Daher führt eine Deborahzahl von 0.1 zu derselben Frequenz und Amplitude wie der newtonsche Fall. Eine sehr große Deborahzahl führt dazu, dass sich die Spannungen viel langsamer auf- und abbauen können. Diese Verzögerung bewirkt, dass nur der Solventanteil der Viskosität wirkt; daher ist die Kollisionsdynamik mit der des newtonschen Falles mit halbierter Viskosität identisch. Im Fall $De = 1$ ergibt sich eine Frequenzerhöhung, da aus den viskoelastischen Spannungen vorwiegend eine Erhöhung der Rückstellkraft resultiert. Der Einfluss der viskoelastischen Rheologie auf zentrale Kollisionen mit dem Ausgang Koaleszenz kann mit einer Erhöhung der Oberflächenspannung verglichen werden, da diese ebenfalls zu einer Erhöhung der Oszillationsfrequenz führt. Ein nichtlinearer Zusammenhang von Deborahzahl und Frequenzveränderung wird auch von Crispell et al.^[21] sowie von Brenn und Teichmeister^[15] für die Oszillation eines viskoelastischen Tropfens beobachtet.

Energie

Abbildung 8.7 zeigt die Entwicklung der verschiedenen Anteile der Energie während der zentralen Kollision viskoelastischer Tropfen mit $De = 1$ im Vergleich mit der Kollision newtonscher Tropfen. Während der Expansion wird ein signifikanter Anteil der Energie als potenzielle Spannenergie in den Polymermolekülen gespeichert. Wenn der Stoßkomplexdurchmesser etwa $2/3$ des Maximaldurchmessers beträgt, erreicht die Spannenergie ihren Maximalwert mit ca. 13 % der initialen kinetischen Energie. Die Dissipation im viskoelastischen Tropfen ist in der initialen Phase ($0 < t^* < 0.5$) überwiegend auf den newtonschen Anteil der Dissipation zurückzuführen. Anschließend steigt der elastische Anteil. Während der Expansionsphase ist die Dissipationsrate des Polymeranteils maximal und beträgt den vierfachen Wert des Solventanteils. Sobald der Maximaldurchmesser erreicht ist, steigt die Dissipation langsamer.

Eine kleine Schwankung der Energiesumme ist im Fall der Kollision viskoelastischer Tropfen zu Beginn des Kollisionsprozesses zu beobachten. Die möglichen Ursachen für diese Schwankung sind in Kapitel 8.1 genannt.

Dezentrale Tropfenkollision

Ein Versatz von $B = 0.72$ wurde für die Analyse der Kollisionsdynamik ausgewählt, da in diesem Fall unterschiedliche Kollisionsausgänge für den newtonschen

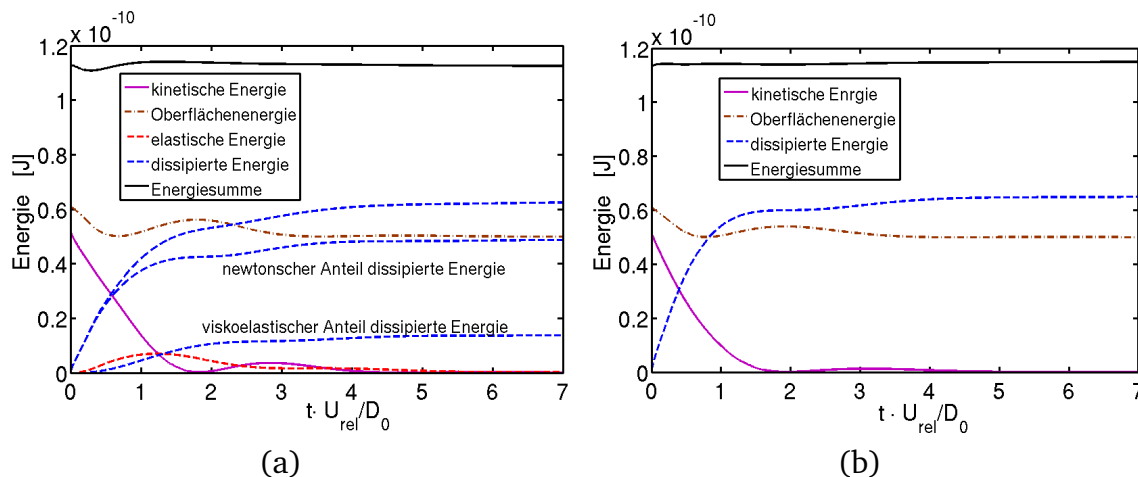


Abb. 8.7.: Energiebilanz während der Kollision viskoelastischer Tropfen mit $De = 1$ im Vergleich zur Kollision eines newtonschen Tropfens. Die Viskosität des newtonschen Tropfens entspricht der Summe aus Polymer- und Solventviskosität des viskoelastischen Tropfens.

und den viskoelastischen Fall auftreten. Das Setup ist in Tabelle A.12 zusammengefasst. Die Evolution der Grenzflächengeometrie ist für die Kollision viskoelastischer Tropfen mit unterschiedlichen Deborahzahlen sowie für eine Kollision newtonscher Tropfen in Abbildung 8.8 dargestellt. Die Tropfen werden bereits mit Kontakt initialisiert, um Probleme der numerischen Stabilität zu umgehen. Der Stoßkomplex dehnt sich und erreicht bei $t^* = 6.4$ im Fall von $De = 0.1$ und 10 die maximale Größe, im Fall von $De = 1$ wird die maximale Größe bei $t^* = 4.8$ erreicht. Die Maximalausdehnung des Stoßkomplexes ist abhängig von der Deborahzahl. Die Deborahzahl 10 führt zur größten Ausdehnung, $De = 1$ führt zur geringsten Ausdehnung. Die Evolution des newtonschen Stoßkomplexes und des viskoelastischen Stoßkomplexes mit $De = 0.1$ sind bis zur Separation des newtonschen Stoßkomplexes nahezu identisch. Die unterschiedliche Ausdehnung führt zu unterschiedlichen Massenträgheitsmomenten und damit zu unterschiedlichen Rotationsgeschwindigkeiten. Zum Zeitpunkt $t^* = 14.4$ zerfällt der newtonsche Tropfen. Vor der Separation ist eine Einschnürung des Kollisionskomplexes klar erkennbar und daher kann die Separation auf den „End-Pinching“ Mechanismus zurückgeführt werden. Der Pinching Mechanismus ist in Kapitel 7.4 erläutert. Die viskoelastischen Tropfen bleiben stabil, die Evolution eines newtonschen Tropfens mit halber Viskosität (nicht dargestellt) führt zur Separation. Die nichtlineare Zunahme der Spannung bei der Dehnung makromolekularer Fluide wird als Dehnverfestigung bezeichnet und verhindert beispielsweise die Verstreckung an der Stelle einer Einschnürung bei der Herstellung von Kunststofffolien^[6]. Der Einfluss der viskoelastischen Rheologie im Zusammenhang mit binären Kollisionen wird auch von Mooney et al. (2010)^[67,68] untersucht. Die Ergebnisse zeigen eine maximale Normalspannung an der Einschnürung und eine Zunahme der minimalen Dicke mit steigender Deborahzahl. Der Zerfall selbst

kann nicht erfasst werden, da die verwendete Interface-Tracking Methode keine Topologieänderung der dispersen Phase zulässt. Eine Analyse der zugrunde liegenden Polymerkonfiguration erfolgt nicht.

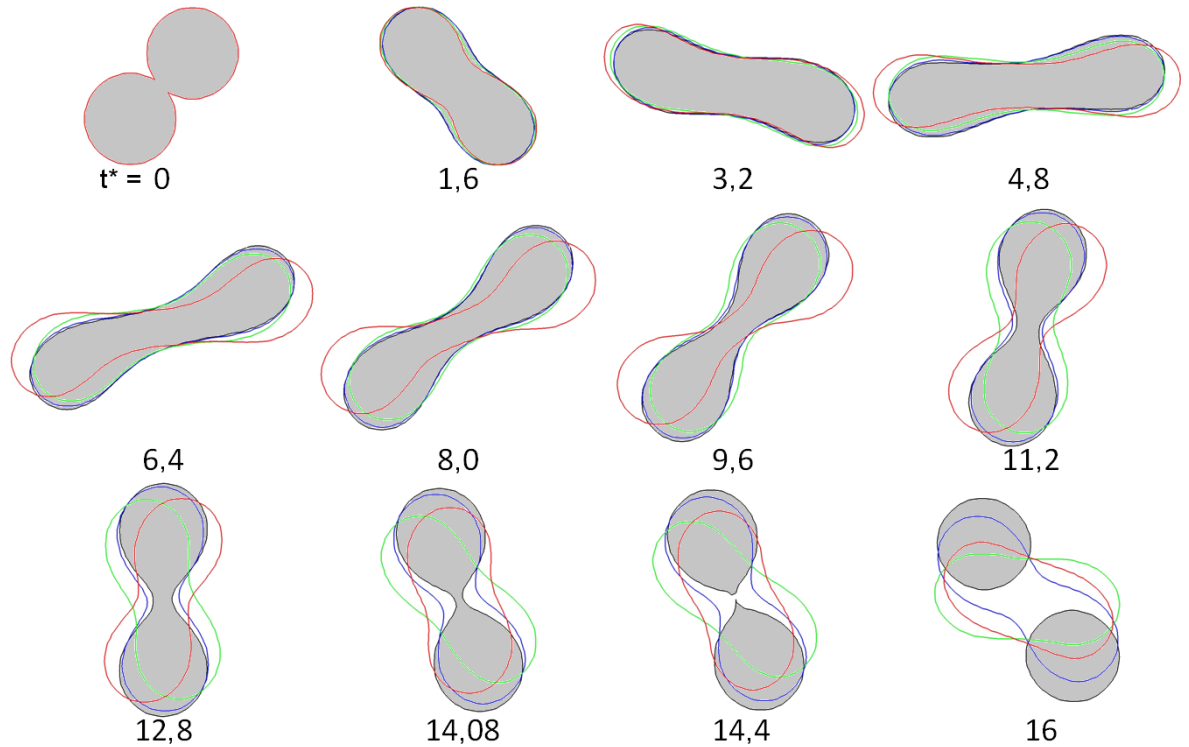


Abb. 8.8.: Evolution der Geometrie des Stoßkomplexes (mit $t^* = t \cdot U_{\text{rel}}/D_0$) bei dezentraler Kollision von Tropfen mit den Parametern $Re=20$, $We = 40$ und $B = 0.72$. Die Geometrie des newtonschen Falls ist grau gefüllt, $De = 0.1$ ist blau, $De = 1$ ist grün und $De = 10$ ist rot umrandet dargestellt.

Die stabilisierende Wirkung des Polymers kann anhand der Molekülorientierung und -Dehnung, Abbildung 8.9, erklärt werden. Im Ligament führt die Oberflächenspannung im Bereich der hohen radialen Krümmung zu einem Druckmaximum. Das Fluid strömt daher aus dem Ligament in die Tropfenenden. Diese Dehnströmung führt zur Streckung der Polymermoleküle. Abbildung 8.9 zeigt, dass die Polymermoleküle um das Fünffache im Vergleich zum Ruhezustand gedehnt werden. Die resultierenden Zugspannungen wirken dieser Dehnströmung entgegen und stabilisieren so den Stoßkomplex. Im Gegensatz zur zentralen Kollision, bei der die Strömungsregime schnell wechseln, besteht die Dehnströmung von Kollisionsbeginn bis $t^* \approx 12$ und führt bei allen betrachteten Deborahzahlen zum Aufbau viskoelastischer Spannungen. Am schnellsten bauen sich die Spannungen bei einer kleinen Relaxationszeit auf. Daher zeigt der Fall mit $De = 0.1$ (entspricht $\lambda = 5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$) eine ähnliche Entwicklung der Stoßkomplexgeometrie wie der newtonsche Fall, dessen viskose Spannungen instantan wirken.

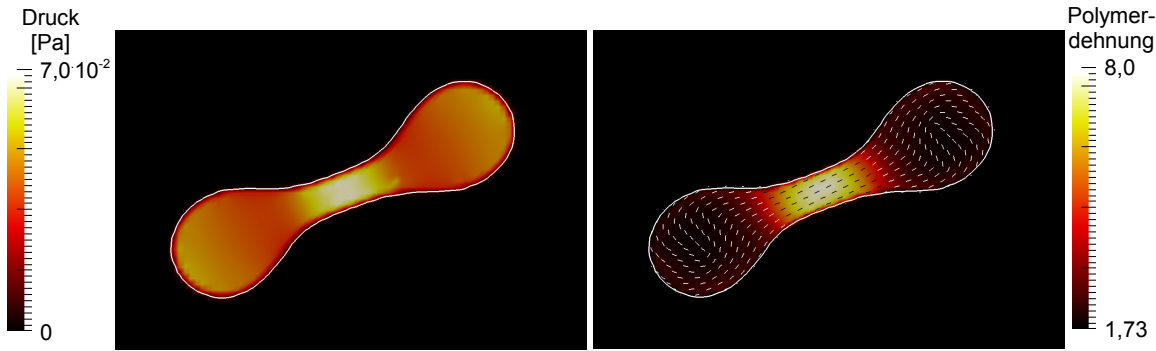


Abb. 8.9.: Druckfeld sowie Dehnung und Orientierung der Polymermoleküle im Fall $De = 10$ bei $t^* = 8.0$.

Energie

Die Energieverläufe für den viskoelastischen Fall mit $De = 10$ und den entsprechenden newtonschen Fall sind in Abbildung 8.10 dargestellt. Der Verlauf der kinetischen, dissipierten und Oberflächenenergie ist in beiden Fällen etwa gleich. Die elastische Spannenergie weist zwei Maxima auf. Bei $t^* = 1.5$ steigt die Spannung aufgrund der Ausdehnung des Stoßkomplexes. Bei $t^* = 14.3$ entsteht ein zweites Maximum, da sich der Stoßkomplex zusammenzieht.

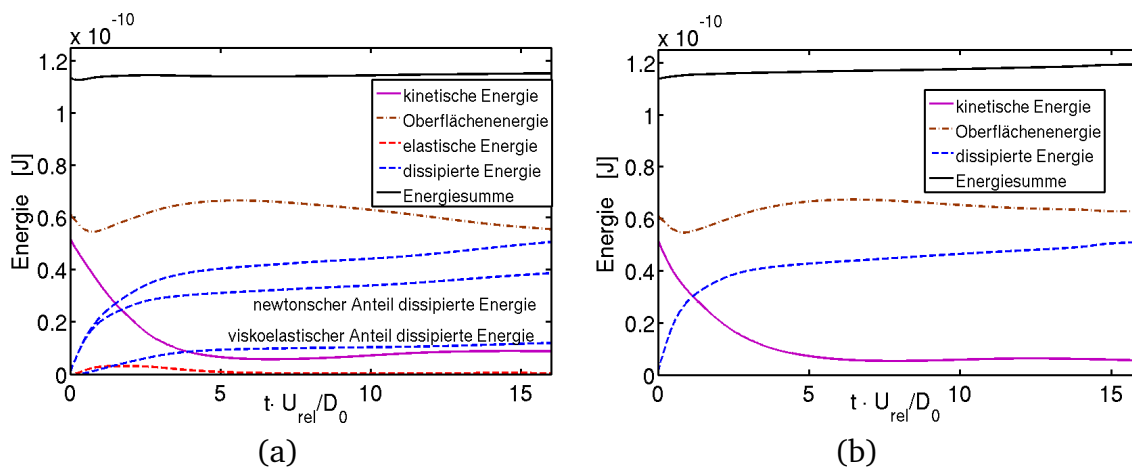


Abb. 8.10.: Energiebilanz während der dezentralen Kollision viskoelastischer Tropfen mit $De = 10$ im Vergleich mit newtonscher Rheologie.

Stabilisierung des Kollisionskomplexes durch viskoelastische Rheologie

Der Energieverlauf alleine ermöglicht noch kein Verständnis des stabilisierenden Effekts der elastischen Spannungen. Das erste Maximum der elastischen Spannener-

gie entsteht, da alle Polymere zu Beginn gedehnt werden. Relevant für den stabilisierenden Effekt ist möglicherweise die Dehnung der Polymermoleküle im Ligament. Die Evolution der maximalen Polymerdehnung im Ligament ist in Abbildung 8.11 dargestellt. Sobald sich das Ligament bildet, steigt die Dehnung der Polymermoleküle stark an. Die Maximaldehnung tritt gleichzeitig mit dem minimalen Ligamentdurchmesser auf. Für die Stabilität ist folglich nicht die Dehnung aller Polymermoleküle (gekennzeichnet durch das Maximum der Spannenergie) relevant, sondern der lokale Zustand der Polymermoleküle im Ligament.

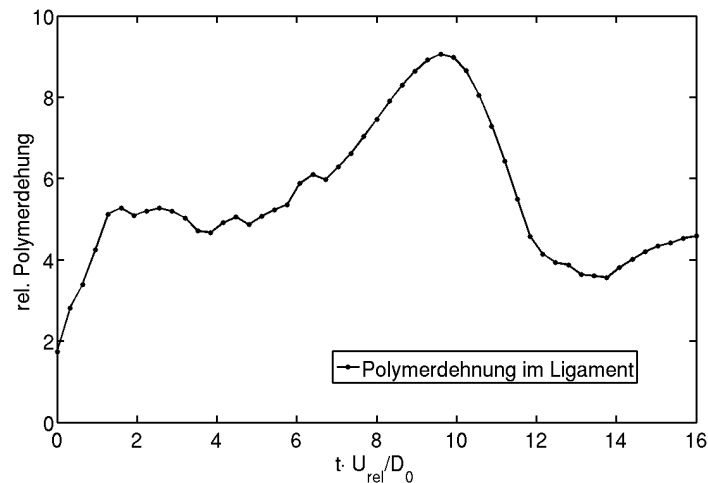


Abb. 8.11.: Polymerdehnung im Ligament der dezentralen Kollision mit $De = 10$.

Fazit

Kollisionen viskoelastischer Tropfen werden untersucht. Zur Modellierung der viskoelastischen Fließeigenschaften wird das Oldroyd-B Modell verwendet, welches ein Prototyp für weitere viskoelastische Modelle darstellt. Zur Diskretisierung wird die PDPS-Methode implementiert^[117]; an der Grenzfläche werden die elastischen Spannungen mittels Multiplikation mit dem Phasenindikator berechnet. Ein Oldroyd-B Fluid weist, im Vergleich zu newtonschen Fluiden, eine elastische Energiekomponente und eine zusätzliche elastische Dissipation auf. Die Ausgabe dieser Energieanteile wird validiert, indem die Summe aller Energieanteile im Fall einer Kollision viskoelastischer Tropfen überprüft wird. Eine Ausgabe des Haupteigenvektors bzw. der Quadratwurzel der Spur des Konfigurationstensors erlaubt die Analyse der gemittelten Orientierung und Dehnung der Polymermoleküle. Die Erweiterung der numerischen Methode wird anhand verschiedener ein- und mehrphasiger Testfälle qualitativ und quantitativ validiert und ermöglicht die Simulation und Auswertung von Zweiphasenströmungen mit einer viskoelastischen Phase.

Bestimmte Einstellungen führen bei der Simulation von Tropfenkollisionen zur Divergenz der numerischen Iteration. Eine systematische Analyse der Einflussfaktoren

zeigt, dass mit einer niedrigen Gitterauflösung und bei einer Initialisierung der Tropfen mit einer kleinen Überlappung keine Stabilitätsprobleme auftreten.

Simulationen sowohl von zentralen als auch von dezentralen Kollisionen viskoelastischer Tropfen werden mit unterschiedlichen Deborahzahlen durchgeführt und mit newtonschen Fällen verglichen. Eine zentrale Kollision kann als Oszillationsvorgang aufgefasst werden. Die Ergebnisse zeigen, dass die viskoelastischen Spannungen zu einer Erhöhung der Oszillationsfrequenz führen. Das Frequenzmaximum tritt bei derjenigen Relaxationszeit auf, die der Zeit für den Wechsel zwischen Beschleunigung und Abbremsung der Strömung entspricht. Die Visualisierung der gemittelten Polymermolekülorientierung und -dehnung zeigt, dass die elastischen Spannungen die Bewegungen des Stoßkomplexes sowohl beschleunigen als auch abbremsen. Insgesamt haben die elastischen Spannungen eine rückstellende Kraft, die – ähnlich einer erhöhten Oberflächenspannungskraft – eine Frequenzerhöhung des Oszillationsvorganges bewirkt.

Bei dezentralen Kollisionen wird eine Verschiebung der Zerfallsgrenze in Richtung Koaleszenz im Vergleich zu newtonscher Rheologie beobachtet. Im Ligament werden die Polymermoleküle in Axialrichtung gedehnt und erreichen ihre maximale Ausdehnung zu dem Zeitpunkt, in der der minimale Ligamentdurchmesser erreicht wird. Folglich ist die stabilisierende Wirkung den Polymermolekülen im Ligament zuzuschreiben.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Binäre Tropfenkollisionen werden als ein Elementarprozess in Sprays betrachtet. Um den Einfluss der Flüssigkeitsrheologie auf die Strömung im Inneren der kollidierenden Tropfen wie auch auf die Kollisionsdynamik zu verstehen, werden Direkte Numerische Simulationen (DNS) mit dem Inhouse-Code Free Surface 3D (FS3D) durchgeführt, einer erweiterten Volume-of-Fluid (VOF) Methode. Kollisionen von ungleich viskosen, scherverdünnenden und viskoelastischen Tropfen werden untersucht.

Bei Tropfenkollisionen entstehen extrem dünne Flüssigkeitslamellen, die bei zu geringer Auflösung in numerischen Simulationen zerfallen. Eine ausreichende Auflösung ist aufgrund der unterschiedlichen Skalen von Lamellendicke und Tropfendurchmesser nicht möglich. Ein Zerfall der Pralllamelle führt zum Verlust der Rückstellkraft der Lamellengrenzfläche, sodass die nachfolgende Kollisionsdynamik erheblich gestört ist. Daher müssen die Flüssigkeitslamellen im numerischen Lösungsverfahren in sinnvoller Weise berücksichtigt werden. Um die Lamelle vor dem auflösungsbedingten Zerfall zu bewahren, wird ein Stabilisierungs-Algorithmus entwickelt, der es ermöglicht, die Kollisionsdynamik in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erfassen. Die Stabilisierung führt eine Korrektur der Oberflächenspannungsberechnung durch, sodass eine Störung durch benachbarte Grenzflächen vermieden wird. Die Stabilisierung bei Symmetrie in der Prallebene ergibt valide Ergebnisse für eine Lamellendicke unter $1\text{ }\mu\text{m}$. Einschränkungen bezüglich der minimalen Lamellendicke werden nicht beobachtet. Um eine Pralllamelle bei einer dezentralen Kollision zu erfassen, ohne die Bewegung und die Deformation der Fluidlamelle einzuschränken, wurde der Stabilisierungs-Algorithmus erweitert. Auch bei hoher kinetischer Energie und großem Versatz der Tropfen kann die Bildung eines dünnen Flüssigkeitsfilms erfasst werden. Die Ergebnisse zeigen, dass die minimale Dicke einer Lamelle in der Nähe des Randes auftritt. Im Fall dezentraler Kollisionen muss die Lamelle eine Mindestdicke von zwei Zellbreiten aufweisen. Dies wird durch das Zufügen von Flüssigkeit garantiert. Gitterstudien zeigen, dass die zugefügte Flüssigkeit selbst bei moderater Auflösung keinen Einfluss auf die Kollisionsdynamik hat.

Die numerische Methode wird erweitert, um Kollisionen von zwei nicht isoviskosen Tropfen zu simulieren. Die Lösung einer zusätzlichen Transportgleichung liefert die Verteilung des Polymer-Massenanteils innerhalb des Stoßkomplexes. Die Viskosität

wird an den Massenanteil gekoppelt und eine sorgfältige Mittelung an der Flüssig-Flüssig-Grenzfläche wird angewendet, um die Dynamik der Grenzfläche zu erfassen. Die in Experimenten beobachtete verzögerte Koaleszenz erschwert eine Simulation, da der Luftfilm, der für die Verzögerung verantwortlich ist, nicht aufgelöst werden kann. Eine Vorhersage des Zeitpunkts der Koaleszenz ist daher nicht möglich. Die verzögerte Koaleszenz wird in der Numerik reproduziert, indem der Topologiewechsel für die Dauer der Verzögerung unterbunden wird. Dazu werden die Kräfte der Oberflächenspannung für beide Tropfen getrennt berechnet. Die numerische Methode wird durch den Vergleich mit experimentellen Daten validiert. In den experimentellen Bildern werden im Inneren des Stoßkomplexes Übergangszonen zwischen hoch- und niedrigviskoser Flüssigkeit beobachtet, die mithilfe der Simulationsergebnisse auf die Krümmung der inneren Flüssig-Flüssig-Grenzfläche zurückgeführt werden können. Das Eindringen eines hochviskosen Tropfens in einen niedrigviskosen Tropfen wird in Übereinstimmung mit dem Experiment vorhergesagt. Im Stoßkomplex kann ein dünnes Ligament identifiziert werden, das die hochviskose Flüssigkeit im Inneren des Kollisionskomplexes mit seiner Oberfläche verbindet. An der inneren Flüssig-Flüssig Grenzfläche zeigt sich ein Drucksprung, der allein auf die Viskositätsdifferenz zurückzuführen ist. Der Drucksprung an der äußeren Grenzfläche ist nicht ausschließlich auf die Grenzflächenspannung zurückzuführen, über ein Viertel der Druckdifferenz ist durch den Beitrag der viskosen Spannungen bedingt.

Der VOF-Code FS3D wird für scherverdünnendes Fließverhalten anhand einer zweiphasigen Spaltströmung und anhand einer Blasenströmung validiert. Der Vergleich mit experimentellen Daten von Tropfenkollisionen zeigt, dass die Dynamik einer Kollision scherverdünnender Tropfen erfasst werden kann. Dieselbe Kollisionsdynamik kann beobachtet werden, wenn eine effektive newtonsche Viskosität eingestellt wird. Um diese zu bestimmen, wird die Viskosität variiert bis der Maximaldurchmesser der Kollision scherverdünnender Tropfen erreicht wird. Der Grund für die Übereinstimmung der Kollisionsdynamik liegt darin, dass nahezu die gesamte viskose Dissipation in der Anfangsphase der Kollision auftritt. In späteren Phasen der Kollision ist der Einfluss der Viskosität minimal, Oberflächen- und Trägheitskraft bestimmen die Kollisionsdynamik. Für dezentrale Kollisionen ist das Konzept der effektiven Viskosität ebenfalls gültig. Die höchsten Dissipationsraten befinden sich bei dezentralen Kollisionen im Zentrum des Stoßkomplexes. Ein effizienter Weg für die Bestimmung der effektiven Viskosität ist die Berechnung einer mittleren Viskosität im Bereich eines reduzierten Kollisionskomplexes, wobei Teile mit geringer Dissipation vernachlässigt werden. Mit steigendem Versatz der Tropfen sinkt die Größe des Bereichs mit hoher Dissipation. Der reduzierte Kollisionskomplex enthält den Bereich des Stoßkomplexes, der die relevante Dissipation für die weitere Kollisionsdynamik aufweist. Diese Vorgehensweise zur Bestimmung der effektiven Viskosität ist für alle betrachteten Kollisionen gültig.

Um Kollisionen viskoelastischer Tropfen zu simulieren, wurde die VOF-Methode für Oldroyd-B Fluide erweitert. Das Oldroyd-B Modell stellt den Prototyp für eine ganze Klasse von Modellen für viskoelastisches Fließverhalten dar. Sowohl zentrale als auch dezentrale Kollisionen viskoelastischer Tropfen wurden mit unterschiedlichen Deborahzahlen simuliert und mit den entsprechenden newtonschen Fällen verglichen. Die Deformation eines Stoßkomplexes bei einer zentralen Kollision kann als Oszillationsvorgang aufgefasst werden. Die Ergebnisse zeigen, dass die Amplitude der Oszillation mit steigender Deborahzahl zunimmt. Die maximale Oszillationsfrequenz tritt bei derjenigen Relaxationszeit auf, die der Zeit entspricht, in der die Strömung zwischen Beschleunigung und Abbremsung wechselt. Bei dezentralen Kollisionen wird der Kollisionskomplex von den elastischen Spannungen stabilisiert. Der Energieverlauf zeigt die Speicherung von elastischer Energie in den gestreckten Polymeren. Der im Oldroyd-B Modell verwendete Konfigurationstensor enthält Informationen über die gemittelten Eigenschaften der Polymermoleküle. Eine Analyse der Dehnung und der Orientierung der Polymermoleküle zeigt, dass die Polymermoleküle im Ligament mit der Ausströmung des Fluids gestreckt werden. Die maximale Polymerdehnung tritt im Ligament auf und verhindert die Ausströmung der Flüssigkeit und folglich auch die Separation des Stoßkomplexes.

Das mechanistische Modell von Roisman et al. [J. Fluid Mech. 690, 512-535, 2012] wird für das sprayrelevante Regime von moderaten Weber- und Reynoldszahlen erweitert, indem eine separate Behandlung der Evolution der Lamellendicke im Zentrum sowie der Abhängigkeit der Lamellendicke vom Radius vorgenommen wird. Die Lamellendickenevolution im Zentrum wird für alle betrachteten Kollisionen mit einem konstanten Parametersatz beschrieben werden. Die Initialbedingungen sowie die Abhängigkeit der Lamellendicke vom Radius liefert eine numerische Simulation der Anfangsphase der Kollision. Eine Analyse der Ergebnisse des Modells und der DNS zeigt, dass die Annahmen des Modells geeignet sind, um die Dynamik einer zentralen Kollision zu erfassen. Insgesamt verringert sich die CPU-Zeit auf 1/300 verglichen mit der Simulation einer gesamten Kollision. Das hybride Kollisionsmodell zeigt eine gute Übereinstimmung mit numerischen Ergebnissen und Experimenten in Bezug auf den Maximaldurchmesser und die Geometrie des Kollisionskomplexes.

Ausblick

Die gewonnenen Ergebnisse zeigen den Einfluss des Fließverhaltens auf Tropfenkollisionen. Ein grundlegendes Verständnis der Physik von Tropfenkollisionen kann experimentell arbeitenden Gruppen helfen, den Zusammenhang von Fließverhalten und Produkteigenschaften besser zu verstehen.

Mit bisherigen Techniken ist die Vorhersage des Kollisionsausgangs Bouncing (Abprallen) nicht möglich. Um alle Kollisionsausgänge mit einer Direkten Numerischen

Simulation vorhersagen zu können, ist die Erfassung des Luftfilms, der die Tropfen im Fall von Bouncing trennt, notwendig. Eine Möglichkeit dazu ist eine Subgridskalen-Modellierung der Filmströmung zwischen den Tropfen. Die Simulation viskoelastischer Strömungen zeigt, dass Probleme mit der numerischen Stabilität zu einer Limitierung der maximalen Auflösung führen. Diese Probleme lassen sich möglicherweise mit einem anderen Diskretisierungsschema des Oldroyd-B Modells lösen oder es muss eine Einfeldformulierung für den Spannungstensor hergeleitet werden, welche die konsistente Behandlung der elastischen Spannungen an der Grenzfläche ermöglicht.

Die mechanistische Modellierung von Tropfenkollisionen eröffnet die Möglichkeit, den Ausgang von Tropfenkollisionen mit einfach lösbaren Gleichungen zu beschreiben. Die in dieser Arbeit vorgestellten Erweiterungen erfassen den Einfluss der Viskosität auf die Kollisionsdynamik. Eine Erweiterung des mechanistischen Modells auf die Kollision ungleichgroßer Tropfen mit Versatz ist nötig, um das Modell zu vervollständigen. Sobald diese Erweiterungen vorliegen, kann das mechanistische Kollisionsmodell in Simulationen mit reduzierten Skalen wie Euler-Euler oder Euler-Lagrange Simulationen eingesetzt werden und ermöglicht eine bessere Berücksichtigung der Kollisionen viskoser Tropfen in der Simulation eines gesamten Sprühprozesses. Das Modell ist nicht auf ein Spray zur Herstellung partikulärer Produkte beschränkt; auch die Simulation anderer Sprays, beispielsweise in einem Verbrennungsmotor, können mit dem Modell verbessert werden.

Literaturverzeichnis

- [1] AGGARWAL, N. und K. SARKAR: *Deformation and breakup of a viscoelastic drop in a newtonian matrix under steady shear*. Journal of Fluid Mechanics, 584:1–21, 7 2007.
- [2] ALBERT, C., H. RAACH und D. BOTHE: *Influence of surface tension models on the hydrodynamics of wavy laminar falling films in Volume of Fluid-simulations*. International Journal of Multiphase Flow, (43):66–71, 2012.
- [3] ANDERSSON, B., R. ANDERSSON, L. HÅKANSSON, M. MORTENSEN, R. SUDIYO und B. VAN WACHEM: *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. Cambridge University Press, 2011.
- [4] ASHGRIZ, N.: *Handbook of Atomization and Sprays: Theory and Applications*. Springer, 2011.
- [5] ASHGRIZ, N. und J. Y. POO: *Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops*. Journal of Fluid Mechanics, 221:183–204, 1990.
- [6] AUHL, D. W.: *Molekulare Struktur und rheologische Eigenschaften strahlenmodifizierter Polypropylene*. Doktorarbeit, 2006.
- [7] BALCI, N., B. THOMASES, M. RENARDY und C. R. DOERING: *Symmetric factorization of the conformation tensor in viscoelastic fluid models*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 166(11):546 – 553, 2011.
- [8] BIRD, B. R. und O. HASSAGER: *Dynamics of Polymeric Liquids*. Wiley series in chemical engineering. Wiley-Interscience, 1987.
- [9] BIRD, R., W. STEWART und E. LIGHTFOOT: *Transport Phenomena*. Wiley International edition. Wiley, 2007.
- [10] BLAŽEK, J.: *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*. Elsevier, 2001.
- [11] BONITO, A., M. PICASSO und M. LASO: *Numerical simulation of 3D viscoelastic flows with free surfaces*. Journal of Computational Physics, 215(2):691 – 716, 2006.
- [12] BOTHE, D., M. KOEBE, K. WIELAGE, J. PRÜSS und H.-J. WARNECKE: *Direct numerical simulation of mass transfer between rising gas bubbles and water*. In: SOMMERFELD, M. (Hrsg.): *Bubbly Flows, Heat and Mass Transfer*, S. 159–174. Springer Berlin Heidelberg, 2004.

-
- [13] BOTHE, D., M. KRÖGER, A. ALKE und H.-J. WARNECKE: *VOF-based simulation of reactive mass transfer across deformable interfaces*. Progress in Computational Fluid Dynamics, 9(6-7):325–331, 2009.
- [14] BRENN, G. und V. KOLOBARIC: *Satellite droplet formation by unstable binary drop collisions*. Physics of Fluids, 18(8):087101, 2006.
- [15] BRENN, G. und S. TEICHTMEISTER: *Linear oscillations of viscoelastic drops used for measuring the polymer retardation time*. In: *12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. ICLASS, 2012.
- [16] BRENN, G., D. VALKOVSKA und K. D. DANOV: *The formation of satellite droplets by unstable binary drop collisions*. Physics of Fluids, 13(9):2463–2477, 2001.
- [17] BRETHERTON, F. P.: *The motion of long bubbles in tubes*. Journal of Fluid Mechanics, 10(02):166–188, 1961.
- [18] CHEN, R.-H.: *Diesel-diesel and diesel-ethanol drop collisions*. Applied Thermal Engineering, 27(2–3):604 – 610, 2007.
- [19] CHEN, R.-H. und C.-T. CHEN: *Collision between immiscible drops with large surface tension difference: diesel oil and water*. Experiments in Fluids, 41:453–461, 2006.
- [20] CHORIN, A.: *Numerical solution of the Navier-Stokes Equations*. Math. Comp., 22:745–762, 1968.
- [21] CHRISPELL, J., R. CORTEZ, D. KHISMATULLIN und L. FAUCI: *Shape oscillations of a droplet in an Oldroyd-B fluid*. Physica D: Nonlinear Phenomena, 240(20):1593 – 1601, 2011.
- [22] COYAJEE, E. und B. J. BOERSMA: *Numerical simulation of drop impact on a liquid-liquid interface with a multiple marker front-capturing method*. Journal of Computational Physics, 228(12):4444–4467, Juli 2009.
- [23] CRESSWELL, R. W. und B. R. MORTON: *Drop-formed vortex rings—The generation of vorticity*. Physics of Fluids, 7(6):1363–1370, 1995.
- [24] CROWE, C., J. SCHWARZKOPF, M. SOMMERFELD und Y. TSUJI: *Multiphase flows with droplets and particles*. Taylor & Francis Group, 2011.
- [25] CUMMINS, S. J., M. M. FRANCOIS und D. B. KOTHE: *Estimating curvature from volume fractions*. Computers and Structures, 83(6–7):425 – 434, 2005.
- [26] CUSSLER, E.: *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*. Cambridge Series in Chemical Engineering. Cambridge University Press, 1997.

-
- [27] DAI, M. und D. P. SCHMIDT: *Numerical simulation of head-on droplet collision: Effect of viscosity on maximum deformation*. Physics of Fluids, 17(4):041701, 2005.
- [28] DEBAR, R.: *A method in two-D Eulerian hydrodynamics*. Technical Report, UCID:19683, 1974.
- [29] DOOLEY, B. S., A. E. WARNCKE, M. GHARIB und G. TRYGGVASON: *Vortex ring generation due to the coalescence of a water drop at a free surface*. Experiments in Fluids, 22:369–374, 1997.
- [30] EGGERS, J., J. R. LISTER und H. A. STONE: *Coalescence of liquid drops*. Journal of Fluid Mechanics, 401:293–310, 1999.
- [31] FATTAL, R. und R. KUPFERMAN: *Constitutive laws for the matrix-logarithm of the conformation tensor*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 123(2–3):281 – 285, 2004.
- [32] FATTAL, R. und R. KUPFERMAN: *Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 126(1):23 – 37, 2005.
- [33] FAVERO, J. L., N. S. M. CARDOZO, A. R. SECCHI und H. JASAK: *Simulation of free surface viscoelastic fluid flow using the viscoelasticInterFoam Solver*. In: *European Symposium on Computer Aided Process Engineering*. Elsevier, 2010.
- [34] FRASER, R. P. und P. EISENKLAM: *Research into the performance of atomizers of liquids*. Journal of the Imperial College Chemical Engineering Society, 7:52–68, 1953.
- [35] FRITSCHING, U.: *Prozess-Spray, Herstellen funktionaler Feststoffpartikeln in Sprühverfahren - Von den Anforderungen an das Pulver und an seine Eigenschaften zum geeigneten Prozess*, 2008. Antrag auf Einrichtung eines DFG-Schwerpunktprogramms.
- [36] FROHN, A. und N. ROTH: *Dynamics of Droplets*. Experimental Fluid Mechanics. Springer, 2000.
- [37] FUSTER, D., A. BAGUÉ, T. BOECK, L. L. MOYNE, A. LEBOSSETIER, S. POPINET, P. RAY, R. SCARDOVELLI und S. ZALESKI: *Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method*. International Journal of Multiphase Flow, 35(6):550 – 565, 2009.
- [38] GAO, T.-C., R.-H. CHEN, J.-Y. PU und T.-H. LIN: *Collision between an ethanol drop and a water drop*. Experiments in Fluids, 38:731–738, 2005.
- [39] GHANNAM, M. T. und M. N. ESMAIL: *Rheological properties of carboxymethyl cellulose*. Journal of Applied Polymer Science, 64(2):289–301, 1997.

-
- [40] GIFFEN, E. und A. MURASZEW: *The Atomisation of Liquid Fuels*. Chapman & Hall, 1953.
- [41] GOTAAS, C., P. HAVELKA, H. A. JAKOBSEN, H. F. SVENDSEN, M. HASE, N. ROTH und B. WEIGAND: *Effect of viscosity on droplet-droplet collision outcome: Experimental study and numerical comparison*. *Physics of Fluids*, 19(10):102106, 2007.
- [42] GUTFINGER, C. und J. A. TALLMADGE: *Films of non-Newtonian fluids adhering to flat plates*. *AIChE Journal*, 11(3):403–413, 1965.
- [43] HALPERN, D. und D. GAVER: *Boundary element analysis of the time-dependent motion of a semi-infinite bubble in a channel*. *Journal of Computational Physics*, 115(2):366 – 375, 1994.
- [44] HANDSCOMB, C., M. KRAFT und A. BAYLY: *A new model for the drying of droplets containing suspended solids*. *Chemical Engineering Science*, 64(4):628 – 637, 2009.
- [45] HANDSCOMB, C., M. KRAFT und A. BAYLY: *A new model for the drying of droplets containing suspended solids after shell formation*. *Chemical Engineering Science*, 64(2):228 – 246, 2009.
- [46] HARVIE, D., J. COOPER-WHITE und M. DAVIDSON: *Deformation of a viscoelastic droplet passing through a microfluidic contraction*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 155(1–2):67 – 79, 2008.
- [47] HEINEN, K.: *Mikrostrukturelle Orientierungszustände strömender Polymerlösungen und Fasersuspensionen*. Doktorarbeit, 2007.
- [48] HERRMANN, M.: *A parallel Eulerian interface tracking/Lagrangian point particle multi-scale coupling procedure*. *Journal of Computational Physics*, 229(3):745–759, 2010.
- [49] HERRMANN, M.: *Detailed numerical simulations of the primary atomization of a turbulent liquid jet in crossflow*. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power-transactions*, 132, 2010.
- [50] HEWSON, R. W., N. KAPUR und P. H. GASKELL: *A model for film-forming with Newtonian and shear-thinning fluids*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 162(1-3):21–28, Okt. 2009.
- [51] HIRT, C. und B. NICHOLS: *Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries*. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201 – 225, 1981.
- [52] HOPPER, R. W.: *Coalescence of two viscous cylinders by capillarity: Part I, Theory*. *Journal of the American Ceramic Society*, 76(12):2947–2952, 1993.

-
- [53] JAKOBSEN, H.: *Chemical Reactor Modeling: Multiphase Reactive Flows*. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [54] JIMENEZ, E., M. SUSSMAN und M. OHTA: *A computational study of bubble motion in Newtonian and viscoelastic fluids*. *Fluid Dynamics and Material Processing*, 1(2):97–108, 2005.
- [55] KEUNINGS, R.: *On the high Weissenberg number problem*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 20(0):209 – 226, 1986.
- [56] KO, G. H. und H. S. RYOU: *Modeling of droplet collision-induced breakup process*. *International Journal of Multiphase Flow*, 31(6):723 – 738, 2005.
- [57] LAFAURIE, B., C. NARDONE, R. SCARDOVELLI, S. ZALESKI und G. ZANETTI: *Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with Surfer*. *Journal of Computational Physics*, 113:134–147, 1994.
- [58] LEFEBVRE, A.: *Atomization and Sprays*. Hemisphere Publishing Corporation, 1989.
- [59] LITTRINGER, E., A. MESCHER, H. SCHRÖTTNER, P. WALZL und N. URBANETZ: *Tailoring particle morphology of spray dried mannitol carrier particles by variation of the outlet temperature*. In: *23rd Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS-Europe, 2010.
- [60] LIU, H. und M. ALTAN: *Science and Engineering of Droplets: Fundamentals and Applications*. *Applied Mechanics Reviews*, 55:B16, 2002.
- [61] LIU, M.: *Untersuchung binärer Kollisionen viskoelastischer Tropfen mittels Direkter Numerischer Simulation*. Masterthesis Universität Darmstadt. 2013.
- [62] MA, C. und D. BOTHE: *Direct numerical simulation of thermocapillary flow based on the Volume of Fluid method*. *International Journal of Multiphase Flow*, 37(9):1045 – 1058, 2011.
- [63] MACINNES, J. M. und F. V. BRACCO: *Comparisons of deterministic and stochastic computations of drop collisions in dense sprays*. In: *Numerical Approaches to Combustion Modeling*, S. 615–642, 1991.
- [64] MACKAY, G. D. M. und S. G. MASON: *The gravity approach and coalescence of fluid drops at liquid interfaces*. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 41(5):203–212, 1963.
- [65] MASTERS, K.: *Spray Drying Handbook*. Longman Scientific & Technical, 1991.
- [66] MISES, R. V. und H. POLLACZEK-GEIRINGER: *Praktische Verfahren der Gleichungsauflösung*. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9:58–77, 1929.

-
- [67] MOONEY, K., S. MENON und D. P. SCHMIDT: *A Computational Study of Viscoelastic Droplet Collisions*. In: *22nd Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS-Americas, 2010.
- [68] MOONEY, K. und D. P. SCHMIDT: *Finite volume simulations of the collision of viscoelastic droplets using adaptive re-meshing and explicit interface tracking*. In: *12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. ICLASS, 2012.
- [69] MOTZIGEMBA, M., N. ROTH, D. BOTHE, H.-J. WARNECKE, J. PRÜSS, K. WIELAGE und B. WEIGAND: *The effect of non-Newtonian flow behaviour on binary droplet collisions: VOF-simulation and experimental analysis*. In: *Proc. 18th Annual Conf. Liquid Atomization and Spray Systems*, S. 559–564. ILASS-Europe, 2002.
- [70] MUKHERJEE, S. und K. SARKAR: *Viscoelastic drop falling through a viscous medium*. *Physics of Fluids*, 23(1):013101, 2011.
- [71] MUNNANNUR, A. und R. D. REITZ: *A new predictive model for fragmenting and non-fragmenting binary droplet collisions*. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(8):873 – 896, 2007.
- [72] NIKOLOPOULOS, N. und G. BERGELES: *The effect of gas and liquid properties and droplet size ratio on the central collision between two unequal-size droplets in the reflexive regime*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(1–3):678 – 691, 2011.
- [73] NIKOLOPOULOS, N., K.-S. NIKAS und G. BERGELES: *A numerical investigation of central binary collision of droplets*. *Computers and Fluids*, 38(6):1191 – 1202, 2009.
- [74] NIKOLOPOULOS, N., G. STROTOS, K. NIKAS und G. BERGELES: *The effect of Weber number on the central binary collision outcome between unequal-sized droplets*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(7–8):2137 – 2150, 2012.
- [75] NIKOLOPOULOS, N., A. THEODORAKAKOS und G. BERGELES: *Off-centre binary collision of droplets: A numerical investigation*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(19-20):4160 – 4174, 2009.
- [76] N.N.: *Manual of the Persistence of Vision Raytracer (Version 3.6)*, 2004.
- [77] NOBARI, M. R., Y. J. JAN und G. TRYGGVASON: *Head-on collision of drops: A numerical investigation*. *Physics of Fluids*, 8(1):29, 1993.
- [78] NOBARI, M. R. H. und G. TRYGGVASON: *Numerical simulations of three-dimensional drop collisions*. *AIAA Journal*, 34:750–755, Apr. 1996.

-
- [79] NOH, W. und P. WOODWARD: *SLIC (Simple Line Interface Calculation)*. Lecture Notes in Physics, 59:330–340, 1976.
- [80] OGUZ, H. N. und A. PROSPERETTI: *Surface-tension effects in the contact of liquid surfaces*. Journal of Fluid Mechanics, 203:149–171, 1989.
- [81] OHTA, M., K. ONODERA, Y. YOSHIDA und M. SUSSMAN: *Three-dimensional simulations of the dynamic motion of single drops rising in viscoelastic FENE-CR model fluids*. Journal of Chemical Engineering of Japan, 42(10):705–712, 2009.
- [82] OLDROYD, J. G.: *On the formulation of rheological equations of state*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 200(1063):523–541, 1950.
- [83] ORME, M. E.: *Experiments on droplet collisions, bounce, coalescence and disruption*. Progress in Energy and Combustion Science, 23(1):65–79, 1997.
- [84] OWENS, R. und T. PHILLIPS: *Computational Rheology*. Imperial College Press, 2002.
- [85] ÖZTASKIN, M. C., M. WÖRNER und H. S. SOYHAN: *Numerical investigation of the stability of bubble train flow in a square minichannel*. Physics of Fluids, 21(4):042108, 2009.
- [86] PAN, K.-L., C. K. LAW und B. ZHOU: *Experimental and mechanistic description of merging and bouncing in head-on binary droplet collision*. Journal of Applied Physics, 103(6):064901, 2008.
- [87] PAN, K.-L. und I. V. ROISMAN: *Note on “Dynamics of inertia dominated binary drop collisions” [Phys. Fluids 16, 3438 (2004)]*. Physics of Fluids, 21(2):022101, 2009.
- [88] PAN, Y. und K. SUGA: *Numerical simulation of binary liquid droplet collision*. Physics of Fluids, 17(8):082105, 2005.
- [89] PASCHEDAG, A. R.: *CFD in der Verfahrenstechnik*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005.
- [90] PASSANDIDEH-FARD, M. und E. ROOHI: *Coalescence collision of two droplets: Bubble entrapment and the effects of important parameters*. In: *14th Annual Mechanical Engineering Conference*, 2006.
- [91] PAUL, E., V. ATIEMO-OBENG und S. KRESTA: *Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice*. John Wiley & Sons, 2003.
- [92] PILLAPAKKAM, S. B., P. SINGH, D. BLACKMOREE und N. AUBRY: *Transient and steady state of a rising bubble in a viscoelastic fluid*. Journal of Fluid Mechanics, 589:215–252, 9 2007.

-
- [93] PLANCHETTE, C., E. LORENCEAU und G. BRENN: *Liquid encapsulation by binary collisions of immiscible liquid drops*. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 365(1–3):89 – 94, 2010.
- [94] PLANCHETTE, C., E. LORENCEAU und G. BRENN: *Binary collisions of immiscible liquid drops for liquid encapsulation*. Fluid Dynamics and Materials Processing, 7(3):279–301, 2011.
- [95] POST, S. L. und J. ABRAHAM: *Modeling the outcome of drop–drop collisions in Diesel sprays*. International Journal of Multiphase Flow, 28(6):997 – 1019, 2002.
- [96] QIAN, J. und C. K. LAW: *Regimes of coalescence and separation in droplet collision*. Journal of Fluid Mechanics, 331:59–80, Jan. 1997.
- [97] RANA, S. und M. HERRMANN: *Primary atomization of a liquid jet in crossflow*. Physics of Fluids, 23(9):091109, 2011.
- [98] REINHOLD, M., C. HORST und U. HOFFMANN: *Experimental and theoretical investigations of a spray dryer with simultaneous chemical reaction*. Chemical Engineering Science, 56(4):1657 – 1665, 2001.
- [99] REIPSCHLÄGER, O., D. BOTHE, H.-C. BROECKER, B. MONIEN, J. PRÜSS, H.-J. WARNECKE, B. WEIGAND und K. WIELAGE: *Modellierung und Simulation zur Optimierung des Zerstäubungsprozesses in einem Ultraschall-Stehwellenfeld*. In: PANRECK, K. und F. DÖRRSCHEIDT (Hrsg.): *Frontiers in Simulation, ASIM Fortschrittsberichte Simulation, 15. Symposium Simulationstechnik, Paderborn 2001*, S. 563–568, 2001.
- [100] REITZ, R.: *Atomization and other Breakup Regimes of a Liquid Jet*. Doktorarbeit, 1978.
- [101] RIDER, W. J. und D. B. KOTHE: *Reconstructing Volume Tracking*. Journal of Computational Physics, 141(2):112 – 152, 1998.
- [102] RIEBER, M.: *Numerische Modellierung der Dynamik freier Grenzflächen in Zweiphasenströmungen*. Doktorarbeit, 2003.
- [103] RIEBER, M. und A. FROHN: *Navier-Stokes Simulation of Droplet Collision Dynamics*. S. 520 – 525, 1997. Proceedings of 7th International Symposium On CFD.
- [104] ROACHE, P. J.: *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. Hermosa Pub, 1998.
- [105] ROISMAN, I. V.: *Dynamics of inertia dominated binary drop collisions*. Physics of Fluids, 16(9):3438–3449, 2004.

-
- [106] ROISMAN, I. V.: *Inertia dominated drop collisions. II. An analytical solution of the Navier–Stokes equations for a spreading viscous film*. Physics of Fluids, 21(5):052104, 2009.
- [107] ROISMAN, I. V., E. BERBEROVIC und C. TROPEA: *Inertia dominated drop collisions. I. On the universal flow in the lamella*. Physics of Fluids, 21(5):052103, 2009.
- [108] ROISMAN, I. V., C. PLANCHETTE, E. LORENCEAU und G. BRENN: *Binary collisions of drops of immiscible liquids*. Journal of Fluid Mechanics, 690:512–535, 2012.
- [109] ROTH, N., M. RIEBER und A. FROHN: *High Energy Head-On Collision of Droplets*. In: *15th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS-Europe, 1995.
- [110] RUDMAN, M.: *Volume-tracking methods for interfacial flow calculations*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 24(7):671–691, 1997.
- [111] SANDER, W.: *Direkte Numerische Simulation von Zerfallsvorgängen in Zweiphasenströmungen im Bereich von Verbrennungsmotoren*. Doktorarbeit, 2011.
- [112] SANDER, W. und B. WEIGAND: *Direct numerical simulation and analysis of instability enhancing parameters in liquid sheets at moderate Reynolds numbers*. Physics of Fluids, 20(5):053301, 2008.
- [113] SCARDOVELLI, R. und S. ZALESKI: *Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow*. Annual Review of Fluid Mechanics, 31:567–603, 1999.
- [114] SCHIEBER, J. D. und C. OETTINGER: *The effects of the bead inertia on the rouse model*. Journal of Chemical Physics, 89(11):6972–6981, 1988.
- [115] SCHRÖDER, J.: *Charakteristika der 'effervescent atomization' rheologisch komplexer und mehrphasiger Flüssigkeiten*. Doktorarbeit, University of Karlsruhe, 2012.
- [116] SEYDEL, P., J. BLÖMER und J. BERTLING: *Modeling particle formation at spray drying using population balances*. Drying Technology, 24(2):137–146, 2006.
- [117] STEWART, P., N. LAY, M. SUSSMAN und M. OHTA: *An improved sharp interface method for viscoelastic and viscous two-phase flows*. Journal of Scientific Computing, 35:43–61, 2008.
- [118] TANGUY, S. und A. BERLEMONT: *Application of a level set method for simulation of droplet collisions*. International Journal of Multiphase Flow, 31(9):1015–1035, 2005.

-
- [119] TEWES, M. und U. A. PEUKER: *Polymerization in sprays - one step from a monomer to a powder polymer*. In: *12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. ICLASS, 2012.
- [120] THORODDSEN, S. T., B. QIAN, T. G. ETOH und K. TAKEHARA: *The initial coalescence of miscible drops*. *Physics of Fluids*, 19(7):072110, 2007.
- [121] TOMAR, G., D. FUSTER, S. ZALESKI und S. POPINET: *Multiscale simulations of primary atomization*. *Computers & Fluids*, 39(10):1864–1874, 2010.
- [122] TRYGGVASON, G., B. BUNNER, O. EBRAT und W. TAUBER: *Computations of multiphase flows by a finite difference / front tracking method. I. Multi-fluid flows..* Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 3, 1998.
- [123] WAGNER, A., L. GIRAUD und C. SCOTT: *Simulation of a cusped bubble rising in a viscoelastic fluid with a new numerical method*. *Computer Physics Communications*, 129(1–3):227 – 232, 2000.
- [124] WAPPEROM, P. und M. A. HULSEN: *Thermodynamics of viscoelastic fluids: The temperature equation*. *Journal of Rheology*, 42(5):999–1019, 1998.
- [125] WIELAGE, K.: *Analysis of Non-Newtonian and Two-Phase Flows*. Doktorarbeit, 2005.
- [126] WILLIS, K. D. und M. E. ORME: *Experiments on the dynamics of droplet collisions in a vacuum*. *Experiments in Fluids*, 29:347–358, 2000.
- [127] WILLIS, K. D. und M. E. ORME: *Binary droplet collisions in a vacuum environment: An experimental investigation of the role of viscosity*. *Experiments in Fluids*, 34:28–41, 2003.
- [128] YAPICI, K., B. KARASOZEN und Y. ULUDAG: *Finite volume simulation of viscoelastic laminar flow in a lid-driven cavity*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 164(1–3):51 – 65, 2009.
- [129] YARIN, A.: *Free Liquid Jets and Films: Hydrodynamics and Rheology*. Interaction of mechanics and mathematics series. Longman Scientific & Technical, 1993.
- [130] YARIN, A. und D. A. WEISS: *Impact of drops on solid surfaces: self-similar capillary waves, and splashing as a new type of kinematic discontinuity*. *Journal of Fluid Mechanics*, 283:141–173, 0 1995.
- [131] YOUNGS, D.: *An interface tracking method for a 3D eulerian hydrodynamics code*. Atomic Weapons Research Establishment, 1987.
- [132] YUE, P., J. J. FENG, C. LIU und J. SHEN: *Diffuse-interface simulations of drop coalescence and retraction in viscoelastic fluids*. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 129(3):163 – 176, 2005.

-
- [133] ZALESAK, S. T.: *Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids*. Journal of Computational Physics, 31:335–362, Juni 1979.
- [134] ZALESKI, S.: *Direct numerical simulation of droplet formation and breakup*. In: *Symposium on Computational Approaches to Multiphase Flow Fluid Mechanics and Its Applications*. IUTAM, 2006.
- [135] ZHANG, P. und C. K. LAW: *An analysis of head-on droplet collision with large deformation in gaseous medium*. Physics of Fluids, 23(4):042102, 2011.
- [136] ZHU, C., M. ERTL und B. WEIGAND: *Direct numerical simulation of the primary jet breakup on non-Newtonian PVP solution*. In: *10. Workshop über Sprays, Techniken der Fluidzerstäubung und Untersuchungen von Sprühvorgängen*. SPRAY, 2012.

A Paramter der Simulationen

Im Folgenden ist das Setup der wichtigsten Simulationen aufgeführt.

| Parameter | Wert |
|---|---|
| Größe des Rechengebiets | $1.2 \cdot 10^{-3} \times 1.2 \cdot 10^{-3} \times 0.6 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $256 \times 256 \times 128$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 3 |
| Tropfendurchmesser | $5.16 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 1.85 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta = 10^{-2} \text{ Pa s}, \rho = 929 \text{ kg/m}^3$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}, \rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $1.85 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |

Tabelle A.1.: Setup der Simulation zur Validierung der Lamellenstabilisierung im Fall einer symmetrischen Kollision; Kapitel 4.2.

| Parameter | Wert |
|---|---|
| Größe des Rechengebiets | $2.4 \cdot 10^{-3} \times 2.4 \cdot 10^{-3} \times 1.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung (maximal) | $512 \times 512 \times 256$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 1 |
| Tropfendurchmesser | $5.16 \cdot 10^{-4} \text{ m}, 5.16 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 1.85 m/s, 1.85 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta = 10^{-2} \text{ Pa s}, \rho = 929 \text{ kg/m}^3$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}, \rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $1.85 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |
| Stabilisierung aktiv | $0.25 \cdot 10^{-3} \text{ s} < t_{\text{stab}} < 3.0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ |

Tabelle A.2.: Setup der Simulation zur Validierung der Lamellenstabilisierung im Fall einer asymmetrischen Kollision, Konfiguration 1; Kapitel 4.3.

| Parameter | Wert |
|---|--|
| Größe des Rechengebiets | $1.1 \cdot 10^{-3} \times 1.1 \cdot 10^{-3} \times 0.55 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $512 \times 512 \times 256$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 1 |
| Tropfendurchmesser | $3.56 \cdot 10^{-4} \text{ m}$, $3.56 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 1.315 m/s, 1.315 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta = 2.18 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$, $\rho = 763 \text{ kg/m}^3$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.66 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.25 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $2.65 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |
| Stabilisierung aktiv | $0.36 \cdot 10^{-3} \text{ s} < t_{\text{stab}} < 0.71 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ |

Tabelle A.3.: Setup der Simulation zur Validierung der Lamellenstabilisierung im Fall einer asymmetrischen Kollision, Konfiguration 2; Kapitel 4.3.

| Parameter | Wert |
|---|--|
| Größe des Rechengebiets | $2.0 \cdot 10^{-3} \times 2.0 \cdot 10^{-3} \times 1.0 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $256 \times 256 \times 128$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 6 |
| Tropfendurchmesser | $7.1 \cdot 10^{-4} \text{ m}$, $7.22 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | $7.45 \cdot 10^{-1} \text{ m/s}$, $7.45 \cdot 10^{-1} \text{ m/s}$ |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta_1 = 2.58 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$, $\eta_2 = 6 \cdot 10^{-2} \text{ Pa s}$ $\rho = 1033 \text{ kg/m}^3$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $6.28 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |
| Koaleszenzverzögerung | $5.84 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ |

Tabelle A.4.: Setup der Simulation der Kollision eines hochviskosen mit einem niedrigviskosen Tropfen gleicher Größe; Kapitel 6.3.

| Parameter | Wert |
|---|---|
| Größe des Rechengebiets | $2.0 \cdot 10^{-3} \times 2.0 \cdot 10^{-3} \times 1.0 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $256 \times 256 \times 128$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 6 |
| Tropfendurchmesser | $7.06 \cdot 10^{-4} \text{ m}$, $4.63 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 0.6 m/s, 2.22 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta_1 = 2.6 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$, $\eta_2 = 6 \cdot 10^{-2} \text{ Pa s}$ $\rho = 1033 \text{ kg/m}^3$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $6.28 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |
| Koaleszenzverzögerung | $1.4 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ |

Tabelle A.5.: Setup der Simulation der Kollision eines hochviskosen und niedrigviskosen Tropfens unterschiedlicher Größe; Kapitel 6.3.

| Parameter | Wert |
|---|--|
| Größe des Rechengebiets | $1.5 \cdot 10^{-3} \times 1.5 \cdot 10^{-3} \times 0.75 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $256 \times 256 \times 128$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 3 |
| Tropfendurchmesser | $5.46 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 4.96 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta_0 = 1.02 \cdot 10^{-1} \text{ Pa s}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ |
| Rheologie disperse Phase | scherverdünnend, $K = 6.69$, $n = 0.83$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $7.0 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |

Tabelle A.6.: Setup der Simulation der zentralen Kollision scherverdünnender Tropfen; Kapitel 7.3.

| Parameter | Wert |
|---|--|
| Größe des Rechengebiets | $1.5 \cdot 10^{-3} \times 1.5 \cdot 10^{-3} \times 0.75 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $256 \times 256 \times 128$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 3 |
| Tropfendurchmesser | $5.46 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 4.96 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta = 5.4 \cdot 10^{-2} \text{ Pa s}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ |
| Rheologie disperse Phase | newonsch |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $7.0 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |

Tabelle A.7.: Setup der Simulation der zentralen Tropfenkollision mit effektiver Viskosität; Kapitel 7.3.

| Parameter | Wert |
|---|---|
| Größe des Rechengebiets | $4.0 \cdot 10^{-3} \times 4.0 \cdot 10^{-3} \times 2.0 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $512 \times 512 \times 256$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 1 |
| Tropfendurchmesser | $5.46 \cdot 10^{-2} \text{ m}$, $5.46 \cdot 10^{-2} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 4.96 m/s, 4.96 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta = 1.02 \cdot 10^{-1} \text{ Pa s}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ |
| Rheologie disperse Phase | scherverdünnend, $K = 6.69$, $n = 0.83$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $7.0 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |
| Stabilisierung aktiv | $0.16 \cdot 10^{-3} \text{ s} < t_{\text{stab}} < 1.0 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ |

Tabelle A.8.: Setup der Simulation der dezentralen Kollision scherverdünnender Tropfen mit einem Versatz von 0.25; Kapitel 7.4.

| Parameter | Wert |
|---|--|
| Größe des Rechengebiets | $6.0 \cdot 10^{-3} \times 6.0 \cdot 10^{-3} \times 0.75 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $512 \times 512 \times 64$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 1 |
| Tropfendurchmesser | $5.46 \cdot 10^{-2} \text{ m}$, $5.46 \cdot 10^{-2} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 4.96 m/s, 4.96 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta = 1.02 \cdot 10^{-1} \text{ Pa s}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ |
| Rheologie disperse Phase | scherverdünnend, $K = 6.69$, $n = 0.83$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $7.0 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |
| Stabilisierung aktiv | $1.4 \cdot 10^{-4} \text{ s} < t_{\text{stab}} < 6.0 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ |

Tabelle A.9.: Setup der Simulation der dezentralen Kollision scherverdünnender Tropfen mit einem Versatz von 0.5; Kapitel 7.4.

| Parameter | Wert |
|---|--|
| Größe des Rechengebiets | $5.0 \cdot 10^{-3} \times 5.0 \cdot 10^{-3} \times 1.25 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $512 \times 512 \times 128$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 1 |
| Tropfendurchmesser | $5.46 \cdot 10^{-2} \text{ m}$, $5.46 \cdot 10^{-2} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | 4.96 m/s, 4.96 m/s |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta = 1.02 \cdot 10^{-1} \text{ Pa s}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ |
| Rheologie disperse Phase | scherverdünnend, $K = 6.69$, $n = 0.83$ |
| Materialparameter kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | $7.0 \cdot 10^{-2} \text{ N/m}$ |
| Stabilisierung aktiv | $1.4 \cdot 10^{-4} \text{ s} < t_{\text{stab}} < 3.2 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ |

Tabelle A.10.: Setup der Simulation der dezentralen Kollision scherverdünnender Tropfen mit einem Versatz von 0.75; Kapitel 7.4.

| Parameter | Wert |
|----------------------------------|---|
| Größe des Rechengebiets | $3.2 \cdot 10^{-3} \times 1.6 \cdot 10^{-3} \times 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $64 \times 32 \times 32$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 3 |
| Tropfendurchmesser | $1 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | $2 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$ |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta_s = 5 \cdot 10^{-4} \text{ Pa s}$, $\eta_p = 5 \cdot 10^{-4} \text{ Pa s}$ $\lambda_1 = 0.005 \text{ s}$, $\lambda_2 = 0.05 \text{ s}$, $\lambda_3 = 0.5 \text{ s}$ $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ |
| Rheologie disperse Phase | viskoelastisch |
| Kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | 10^{-5} N/m |

Tabelle A.11.: Parameter der Simulation der zentralen Kollision viskoelastischer Tropfen. Die Indizes 1, 2, 3 entsprechen $De = 0.1$, 1 und 10; Kapitel 8.2.

| Parameter | Wert |
|----------------------------------|---|
| Größe des Rechengebiets | $6.4 \cdot 10^{-3} \times 1.6 \cdot 10^{-3} \times 3.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ |
| Auflösung | $128 \times 32 \times 64$ |
| Anzahl der Symmetrieebenen | 1 |
| Tropfendurchmesser | $1 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ |
| Geschwindigkeit | $2 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$ |
| Materialparameter disperse Phase | $\eta_s = 5 \cdot 10^{-4} \text{ Pa s}$, $\eta_p = 5 \cdot 10^{-4} \text{ Pa s}$ $\lambda_1 = 0.005 \text{ s}$, $\lambda_2 = 0.05 \text{ s}$, $\lambda_3 = 0.5 \text{ s}$ $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ |
| Rheologie disperse Phase | viskoelastisch |
| Kontinuierliche Phase | $\eta = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$, $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$ |
| Oberflächenspannung | 10^{-5} N/m |

Tabelle A.12.: Parameter der Simulation der dezentralen Kollision viskoelastischer Tropfen. Die Indizes 1, 2, 3 entsprechen $De = 0.1, 1$ und 10 ; Kapitel 8.2.

Lebenslauf

Persönliche Daten

| | |
|----------------|---------------------------|
| Name: | Christian Alexander Focke |
| Geburtsdatum: | 22. 10. 1982 |
| Familienstand: | verheiratet |

Schulbildung

| | |
|-------------------|--------------------------------|
| 09/1993 - 06/2002 | Gymnasium in Wiesbaden, Abitur |
|-------------------|--------------------------------|

Zivildienst

| | |
|-------------------|---|
| 07/2002 - 04/2003 | Essen auf Rädern, Arbeiter Samariter Bund Wiesbaden |
|-------------------|---|

Studium

| | |
|-----------------|---|
| 9/2003 - 8/2009 | RWTH-Aachen, Maschinenbau / Luft- und Raumfahrt-technik, Dipl.-Ing. |
|-----------------|---|

Beruflicher Werdegang

| | |
|-----------------|--|
| 9/2009 – 6/2013 | Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Center of Smart Interfaces, Institut für Mathematische Modellierung und Analysis |
| ab 7/2013 | Industrietätigkeit bei der Nogrid GmbH, Weiterentwicklung der Simulationmethode Finite Pointset Method |